

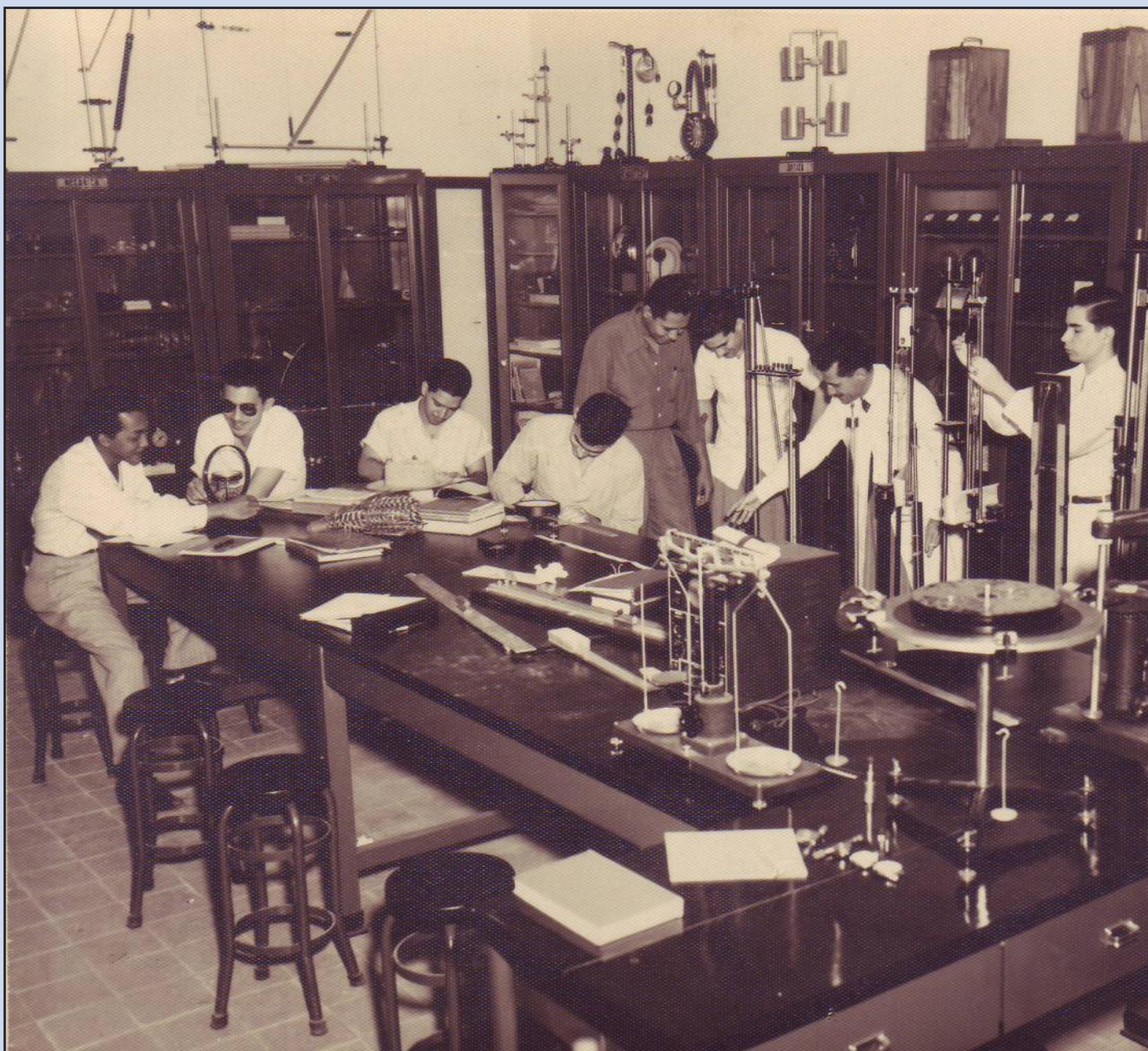
FÍSICA

REVISTA CUBANA DE FÍSICA

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

VOL.29 No.1
JUN., 2012

LA FÍSICA EN EL ORIENTE DE CUBA



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.cfmac.csic.es

O. DÍAZ-RIZO
Instec, La Habana
odrizo@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 Grade du Sul
cesarzen@cesarzen.com

DISEÑADORES

ERNESTO ANTÓN
E. ALTSHULER

EDICIÓN WEB

R. CUAN
rcuan@fisica.uh.cu

PORTADA: El profesor Roberto Soto del Rey, figura legendaria de la Física en el oriente del país, fue fundador del Departamento de Física de la Universidad de Oriente. En la foto (tomada en el período 1962-64 en uno de los primeros laboratorios de Física de la Universidad de Oriente) es el segundo, contando de derecha a izquierda

TODOS LOS ARTÍCULOS EN FORMATO ELECTRÓNICO SE ENCUENTRAN EN:

www.fisica.uh.cu/biblioteca/revcubfis

COORDENADAS

- 2 LA FÍSICA EN EL ORIENTE DE CUBA DESDE 1970 HASTA LA FECHA
[PHYSICS IN EASTERN CUBA FROM 1970 TO THIS DAY] / P. Muné, J. J. Guillarón y L. M. Méndez

ARTÍCULOS ORIGINALES

- 4 USO DEL MÉTODO DE IMPACTO ECO EN RESTAURACIÓN EN LA HABANA VIEJA
[USE OF IMPACT-ECHO METHOD IN RESTORATION IN OLD HAVANA]/ E. Moreno, M. Hernández, H. Calas, J. Figueredo, M. D. Durruthy-Rodríguez, L. Leija, B. Rubio y J. López de Ipiña
- 8 DIFUSIÓN DE ÁTOMOS DE Ar EN SUPERFICIES DE MgO (100)
[DIFUSION OF Ar ATOMS ON MgO (100) SURFACES]/ J. González-Mantecón, S. Miret-Artés y G. Rojas-Lorenzo
- 14 ALGORITMOS DE TRANSMISIÓN DE MENSAJES EN EL FERROMAGNÉTICO DE ISING BIDIMENSIONAL
[MESSAGE-PASSING ALGORITHMS FOR THE BIDIMENSIONAL ISING FERROMAGNET]/ E. Domínguez, A. Lage y R. Mulet
- 21 INFLUENCIA DE LA ALTURA DEL CONTACTO EN LA DISTRIBUCIÓN DE TEMPERATURA Y RESISTENCIA TÉRMICA EN DIODOS LÁSER DE GaInNAs
[INFLUENCE OF RIDGE HEIGHT IN THE TEMPERATURE DISTRIBUTION AND THERMAL RESISTANCE OF GaInNAs LASER DIODES]/ A. Abelenda, I. Delgado y M. Sánchez
- 28 ESTUDIO DE CERÁMICAS LIBRES DE PLOMO DEL COMPUESTO PIEZOELECTRICO
[(K_{0.5}Na_{0.5})_{0.94}Li_{0.06}] _{0.97}LA_{0.01}(NB_{0.9}TA_{0.1})O₃
[STUDY OF LEAD-FREE CERAMICS OF THE PIEZOELECTRIC COMPOSITE
[(K_{0.5}Na_{0.5})_{0.94}Li_{0.06}] _{0.97}LA_{0.01}(NB_{0.9}TA_{0.1})O₃]/ H. H'Mok, A. Duarte, J. Portelles, J. Fuentes, M. D. Durruthy-Rodríguez, O. Raymond, J. Heiras, M. P. Cruz, J. M. Siqueiros

MOMENTOS DE LA FÍSICA EN CUBA

- 33 ROBERTO SOTO DEL REY, FUNDADOR DE LA UNIVERSIDAD DE ORIENTE Y FUNDADOR DEL DEPARTAMENTO DE FÍSICA
[ROBERTO SOTO DEL REY, FOUNDER OF THE UNIVERSITY OF ORIENTE AND ITS PHYSICS DEPARTMENT]/ L. M. Méndez-Pérez, E. J. Roca-Oria y C. A. Cabal-Mirabal

PARA FÍSICOS Y NO-FÍSICOS

- 37 FÍSICA Y MÚSICA: DEL TIMBRE A LO DESCONOCIDO/ D. Stolik

NUESTRA FÍSICA EN NOTICIAS

COMENTARIOS

LA FÍSICA EN EL ORIENTE DE CUBA DESDE 1970 HASTA LA FECHA

P. MUNÉ, J. J. GUILLARÓN Y L. M. MÉNDEZ

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

La carrera de Física nace en la Universidad de Oriente (UO) en el año 1970. Aunque desde la fundación de la Universidad en 1947 existía un Departamento de Física que impartía esta disciplina a estudiantes de ingenierías y de otras ciencias, la creación de la carrera marcó un hito importante respecto a la investigación como parte de la formación de los físicos y al vínculo de esta ciencia con la industria y la sociedad en general para la región oriental del país.

Desde los inicios de la carrera se tuvo la intención de formar un profesional que pudiese insertarse de forma activa en la industria. Además de insistir en un profundo dominio de las leyes de la Física, se hacía énfasis en la capacidad de aplicarlas de manera transformadora. Esa idea se vio materializada en la primera graduación, la cual fue de ingenieros físicos y no de licenciados en Física como son las graduaciones actuales. La intención inicial tomó con los años carácter de tradición, engendrando en el claustro una cultura de trabajo por la innovación basada en la aplicación del conocimiento físico. Son dignos ejemplos de esta cultura, la creación en la región oriental del país de un espectrofluorímetro y de un tomógrafo de resonancia magnética nuclear bajo la dirección de los profesores Dr. Jorge Ricardo Pérez y Dr. Carlos Cabal Mirabal respectivamente, egresados de la primera graduación de la Universidad de Oriente. Tales resultados no tenían antecedentes en el país.

La impartición del currículo de Física en los primeros años de la carrera estaba a cargo de cinco departamentos docentes, a saber: Física Nuclear, Óptica y Espectroscopía, Física de los Rayos X y Metales, Física General y Teórica y Física Electrónica.

Los tres primeros departamentos, siguiendo la metodología de la escuela soviética, ofrecían especialización a los alumnos, los que debían realizar investigaciones aplicadas en sus respectivos campos. Los dos últimos tenían como misión apoyar las investigaciones de los primeros, y ofrecer la formación básica de los estudiantes. Al parecer, tal manera de impartir el currículo contribuyó a que se hicieran realidad los ejemplos de innovación antes mencionados en particular y, en general, el nacimiento de la tradición ligada a la aplicación creadora de los conocimientos físicos que ha caracterizado el desarrollo de la Física en la región oriental del país, hasta nuestros días.

Debido a cambios estructurales en la UO, el número inicial de departamentos se modificó en diferentes etapas, conformando un único Departamento en el año 1990 hasta la actualidad. Sin embargo, la tradición antes descrita se mantuvo.

En la segunda mitad de la década de los ochenta desaparecen las investigaciones en Física Nuclear en la UO, las cuales fueron concentradas en la ciudad de la Habana. Por esa y otras razones en este período hubo una marcada emigración de físicos formados en la UO, que trabajaban como profesores, hacia otras instituciones. Algunos de ellos se desempeñaron en cargos importantes a nivel nacional como el Dr. Ramón Pomés Hernández, quien fuera vicepresidente de la Academia de Ciencias de Cuba, y el Dr. Fabio Fajardo Moro, quien dirigió durante varios años el Instituto de Meteorología. Sin embargo, la tradición en las ramas de la Física antes mencionada se afianzó, dando lugar a la creación de dos fuertes líneas de investigación que llegan hasta la actualidad: Biofísica Médica y Materiales Avanzados.

La línea de Biofísica Médica, que venía desarrollándose dentro del Departamento de Física desde finales de los años ochenta, fue la célula que engendró el Centro de Biofísica Médica (CBM) en 1993, que dirige su accionar al diagnóstico y la terapéutica de enfermedades por medio de la Biofísica. En este centro se ha diseñado y construido uno de los instrumentos más complejos que se haya fabricado en Cuba: un tomógrafo de resonancia magnética nuclear (Ver Rev. Cub. Fis. **28**, 68 (2011)). El CBM continúa desarrollando productos y su campo de acción se ha extendido también al área de software para el análisis y transporte de imágenes médicas con el fin de facilitar el diagnóstico rápido y certero en cualquier lugar del país, entre otros muchos trabajos.

La experiencia en la rama de la Biofísica se ha extendido también a otro centro importante de la Universidad de Oriente, el Centro Nacional de Electromagnetismo Aplicado (CNEA) que trabaja en terapias para el cáncer y otras enfermedades por métodos electromagnéticos. Vale señalar que el Dr. Roberto Soto del Rey –uno de los fundadores de la Cátedra de Física en 1947 y de la carrera en 1970, quien se desempeñó como profesor de Física Teórica del claustro– era amante de la Biofísica. Aún se conservan en la biblioteca de nuestra universidad, los cuatro tomos de su obra dedicada íntegramente a esta rama de la ciencia. En nuestra opinión, su influencia en los estudiantes

está presente en la tradición que hoy existe en la UO en las investigaciones biofísicas. Los antecedentes de esta línea hacia el interior de la UO podrían verse como una síntesis de los avances que obtuvo la Física en la región oriental del país en ramas como la Física Nuclear, la Espectroscopía y la Electrónica.

Por su parte la línea de Materiales Avanzados se dedica al estudio de sus propiedades, desarrolla métodos de caracterización y ensayos no destructivos. Entre los materiales que se estudian se incluyen los siguientes: magnéticos, superconductores, conductores iónicos y ferroeléctricos. También se estudian técnicas de caracterización como el ruido Barkhausen y otras. Esta línea tiene sus antecedentes fundamentalmente en el Departamento de Rayos X y Metales que existía en los inicios de la carrera. Se ha desarrollado desde la década de los noventa hasta la fecha en fuerte colaboración con la Universidad de la Habana y algunas universidades brasileñas y españolas. De igual forma, la herencia del Departamento de Óptica y Espectroscopía se refleja también dentro de esta línea en las investigaciones relacionadas con la holografía digital que se orienta hacia el estudio de materiales, aunque recientemente comienzan a aplicarse en material biológico, enlazándose con la rama de la Biofísica. El núcleo central de esta línea radica en el actual Departamento de Física, y juega un papel destacado en los resultados de investigación de la UO en cuanto a publicaciones y premios. Por ejemplo, en los últimos dos años, investigaciones dentro de esta línea han merecido tres Premios de la Academia de Ciencias.

De igual forma, como genuino resumen de toda la experiencia acumulada en la enseñanza de la Física en la UO, algunos profesores investigan en Didáctica de la Física como parte de una línea de investigación denominada "Didáctica de las Ciencias". Una parte importante de este trabajo se dedica actualmente al problema de la orientación vocacional-profesional y al establecimiento de estrategias que estimulen el ingreso de los estudiantes de preuniversitario a la carrera de Licenciatura en Física, estableciéndose un vínculo con la enseñanza precedente. Es de destacar que existe una relación de trabajo en esta temática con el Instituto de Física de San Carlos, Universidad de San Pablo (Brasil), formalizada en un Proyecto de Investigación entre este instituto y el departamento de Física de la UO. La participación del estudiantado de la carrera de Licenciatura en Física en la actividad de orientación vocacional-profesional está siendo muy importante y pensamos sea decisiva en el afán

de incrementar la matrícula de la carrera, lo cual es un problema internacional y una necesidad del país.

Actualmente comienzan a establecerse como línea de investigación el estudio de la Física de las Mareas, teniendo en cuenta su importancia en la prevención de desastres en la costa sur oriental. En esta dirección de trabajo estarían vinculados, además del departamento de Física, el Centro Meteorológico Provincial y el Centro de Estudios de Manejo Integrado de Zonas Costeras de la UO. Los profesores involucrados en esta investigación son jóvenes, por lo que no existe una larga tradición en la misma. Sin embargo, algunos estudiantes se han inclinado por realizar sus trabajos científicos en esta temática, lo que ha favorecido la apertura de una Unidad Docente en el Centro Meteorológico Provincial. Por las características de los trabajos y su necesidad real en la región oriental le auguramos muy buenos resultados en el futuro.

No podríamos finalizar esta breve caracterización de la Física en la región oriental sin mencionar las principales dificultades que enfrentamos en la actualidad. Para la Física como ciencia y en especial para la parte experimental, se han ido encareciendo sus métodos de estudio producto de su largo desarrollo y de los avances tecnológicos. Como ejemplos podemos citar que un difractómetro de rayos X y un magnetómetro SQUID, instrumentos comunes en el estudio de las ciencias de materiales, no es posible obtenerlos en la actualidad por valores menores que un cuarto y medio de millón de dólares respectivamente. Luego, en nuestra opinión el camino para lograr una Física autóctona, implicada con los problemas nacionales, y competitiva a nivel internacional, necesita la creación de laboratorios nacionales con facilidades para el uso común de todos los físicos del país. La importancia científica y práctica de los trabajos que se pretendan desarrollar en tales laboratorios podría ser valorada con anterioridad mediante la presentación de proyectos.

Aunque los laboratorios docentes de Física de las universidades han sido realmente mejorados en los últimos 5 años (gracias, fundamentalmente, a una inversión basada en un crédito en la República Popular China), la investigación científica, eje conductor de la carrera, continúa afectada en el trabajo experimental. La colaboración internacional ha favorecido grandemente el posgrado y el pregrado en este sentido, pero no es posible obviar las limitaciones reales que hoy enfrentamos.

USO DEL MÉTODO DE IMPACTO ECO EN RESTAURACIÓN EN LA HABANA VIEJA

USE OF IMPACT ECHO METHOD IN RESTORATION IN OLD HAVANA

E. MORENO^a, M. HERNÁNDEZ^a, H. CALAS^b, J. FIGUEREDO^c, M. D. DURRUTHY-RODRÍGUEZ^{at}, L. LEIJA^c, B. RUBIO^d y J. LÓPEZ DE IPÍÑA^d

a) Grupo de Ultrasonica, ICIMAF, La Habana, Cuba; moreno@icimaf.cu, moises@icimaf.cu, dolores@icimaf.cu[†]

b) Grupo de Señales, Sistemas y Tecnologías Ultrasonicas (CAEND-CSIC), Madrid, España; hcalass@gmail.com

c) Cinvestav, IPN, DF, México; joelay@gmail.com, lleija@df.cinvestav.mx

d) Leia, Miñano, Alava, España; benjamin.rubio@tecnalia.com

[†] autor para la correspondencia

El método de impacto para las ondas mecánicas es una técnica de ensayos no destructivos (END) desarrollado para la determinación del estado del hormigón en puentes y carreteras. En este trabajo se hace una extensión del mismo al diagnóstico de edificaciones en restauración. El método presenta un grupo de cualidades que hacen atractiva su extensión en la determinación precisa de defectos (hendiduras, embutidos, agujeros, espesor de la estructuras y la laminación), para lo que no se necesita una gran infraestructura instrumental. Se presenta un estudio preliminar de la aplicación de método de impacto eco en la detección de fallas en un edificio de La Habana Vieja. Particularmente se estudia la evaluación de columnas del Hotel Santa Isabel, construido en el siglo XVIII con las columnas de piedras calcáreas y repello de estuco a base de cemento.

The impact method for mechanical waves is a nondestructive testing technique (NDT) developed for the determination of the state of the concrete in bridges and highways. In this work it is carried out its extension to the diagnosis of buildings in the restoration process. The method shows a group of features that makes it attractive: the precise determination of defects (fissures, inlays, holes, thickness of structures and lamination) and it doesn't need great instrumental assembly for its application. It is presented a preliminary study of the application of the impact echo method in the flaw detection in one building of Old Havana. Particularly the evaluation of columns is studied for the case of Santa Isabel Hotel, constructed in the eighteenth century with ashlar's columns of calcareous rocks covered with stucco based on cement.

PACS: Mechanical testing, 81.70.Bt, Nondestructive testing 81.70.-q, elastic constant 62.20.Dc

INTRODUCTION

In Cuban colonial times buildings were made from different materials as wood, bricks, and a mixture of different calcareous rocks from the sea. The politics of conservation of old structures needs the development of non destructive methods for evaluating the health of buildings and monuments made by the Spanish government in Cuba.

The impact echo method (IEM), based on the propagation of elastic waves and resonance phenomena, is well known for concrete structures [1]. Like the ultrasound method, from the point of view of the use of mechanical waves, the IEM has the advantage that it can evaluate the structure from only one side. In the case of ultrasound, the transmission method is more used due to scattering phenomena in the coarse grain of the concrete. The fundamental idea of the IEM is to produce resonance frequencies of the material under test, so longer wavelengths are employed. This means a better resolution relative to the scattering [2].

Nevertheless, the IEM has been used in concrete and similar building materials [1-5], in which there is great experience. For the case of restoration with older materials, the use of IEM and

the study of its performance in practical applications is less common. This is the case of Old Havana. In this paper the IEM is applied to health structure evaluation of the columns of ashlar of calcareous rocks covered with stucco based on cement in Santa Isabel Hotel, located at the eastern side of the Plaza de Armas, in Old Havana. Figure 1 shows a photo of this building; a mansion which was constructed for the Countess of San Juan de Jaruco but that was later bought by the Count of Santoveña, whose initials can be seen in the decorative iron balcony rails. It was converted into a hotel in 1867 [6]. Recently it was restored, and is now run by the Office of the City Historian of Havana through its company called Habaguanex.

IMPACT ECHO METHOD

In Figure 2, a block diagram of the impact echo method is shown. An impact transducer hits one side of the element (in this case a column). The short time of the hit implies that it can be assumed as a delta function which contains all the spectral frequencies. The structure acts as a filter absorbing the fundamental and overtone frequencies for resonance. A pick up transducer is employed in order to detect the resonance sig-

nals, which are evaluated with the use of Fast Fourier Transform (FFT). In this case, the signal is recorded by a Tektronics oscilloscope and sent to a PC for FFT evaluation implemented with *Matlab 7.0*. A spectral pattern will be used as a clue for evaluating homogeneities in the structure. This is possible because we can compare the result with a theoretical spectral pattern obtained from FEM in a healthy column. The pick up transducer was developed using piezoceramics PZT (Figure 3).



Figure 1: The Santa Isabel Hotel, located in the Plaza de Armas, Old Havana.

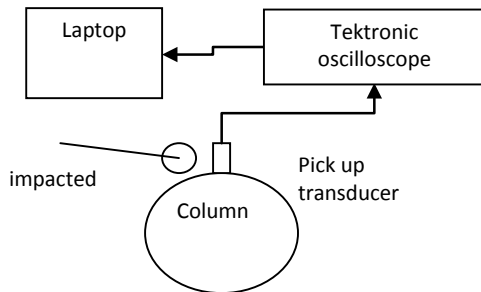


Figure 2: Block diagram of the Impact Echo Method setup.

SANTA ISABEL HOTEL. EVALUATION



Figure 3: Photographs of the Pick up transducer and impactors.

SIMULATION RESULTS

Figure 4 shows the spectral pattern obtained with FEM. The peaks correspond to modals from a circumferential slide of the column with an average diameter of 45 cm [7, 8].

It is assume a plain strain condition with a longitudinal velocity of 3000 m/s, according to an ultrasonic evaluation of the material using the transmission method with 54 kHz transducers. A Poisson ratio of 0.2 and a density of 2500 kg/m³ were assumed. In Figure 5 the firsts four eigenvectors are shown.

Figure 6 a) and b) shows two photos of columns situated in the first level of the Santa Isabel Hotel. Four columns situated in the middle of each side of the inner balcony were evaluated in the test. Figure 6 c) and d) show one of these columns with visible cracks and the experimental application of the impact echo method respectively.

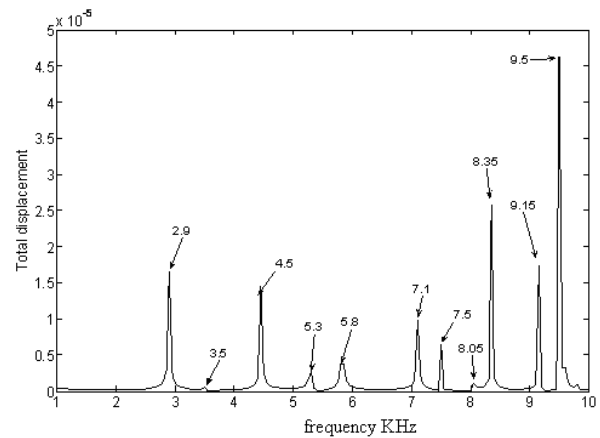


Figure 4: Harmonic analysis of a circumferential slide of the column. A plain strain condition is assumed.

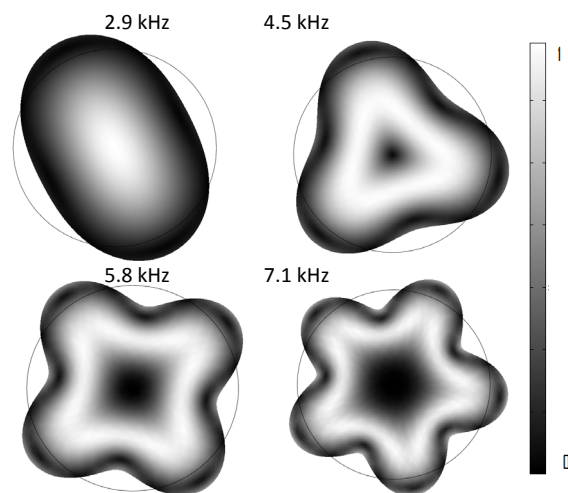


Figure 5: Deformation in relative color scale that corresponds to the firsts four modal frequencies. Only the strongest modes are shown.



Figure 6: a) and b) details of the columns in the interior balcony in the Santa Isabel Hotel, c) Cracks in one column, d) An example of the application of the impact echo method in a column.

RESULTS

Figure 7 shows two spectral patterns A and B, obtained from two columns with a visual good condition. They serve as reference for comparing with others patterns that could present external cracks. In order to confirm this, it is necessary to compare with theory for the case of homogeneous material. The next expressions obtained with FEM for the first four peaks are useful for this task [9].

$$\begin{aligned} f_1 &= 0.92 \frac{V_L}{2D} \\ f_2 &= 1.5f_1 \\ f_3 &= 2.0f_1 \\ f_4 &= 1.5f_1 \end{aligned} \quad (1)$$

Here V_L is de longitudinal velocity of 4000 m/s and a diameter $D = 0.45$ m is assumed for theoretical calculations.

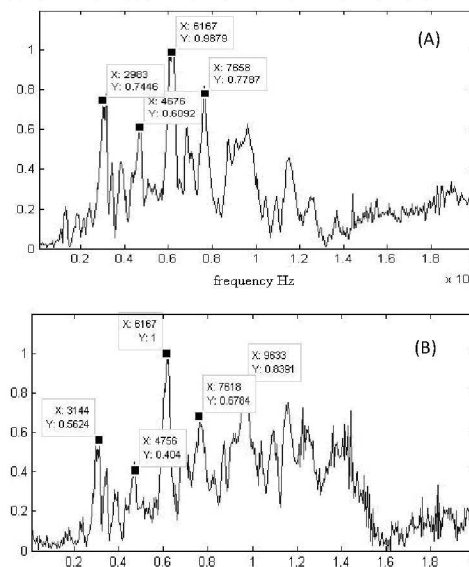


Figure 7: Spectral patterns A and B from two columns without cracks. X is the frequency value and Y, the relative amplitude.

With this expression, the following table is obtained according to the frequency peaks of Figure 7 and expressions (1).

Model	Theoretical relations	Frequency (A)* Hz (relation)	Frequency (B)* Hz (relation)
1	1.5	2983 (1.00)	3144 (1.00)
2	1.5	4676 (1.57)	4756 (1.50)
3	2.0	6167 (2.07)	6167 (1.96)
4	2.4	7658 (2.57)	7618 (2.42)

* (A) and (B)* from Fig. 8. In parenthesis the experimental relations relative to its first mode. Theoretical relation according to equation (1).

Comparing the theoretical relations with the experimental ones, there is a good agreement between them. This means that the column was in good condition as it was suspected, according to visual inspection. If there were a defect, then a spectral peak would appears with a relative weight strong enough to hide the normal peaks. Then, it is possible to use the two spectral patterns A and B, as references for columns without cracks.

As a detail, if we take the experimental measurement of $f_1 = 2983$ Hz, the velocity will give the following value:

$$C_p = \frac{2Df_1}{0.92} = 2918 \text{ m/s} \quad (2)$$

This value agrees with the ultrasonic one value obtained at 54 kHz.

In Figure 8 we show a spectral pattern of the columns with visual cracks (Figure 6). In this case there is a different spectral pattern compared with the previous cases. A peak frequency of 1169 Hz appears.

This low frequency could be interpreted as laminations of the stucco vibrating in a flexural mode. Then, it was possible to evaluate the interior of this column, "in good condition", and only the stucco has to be repaired.

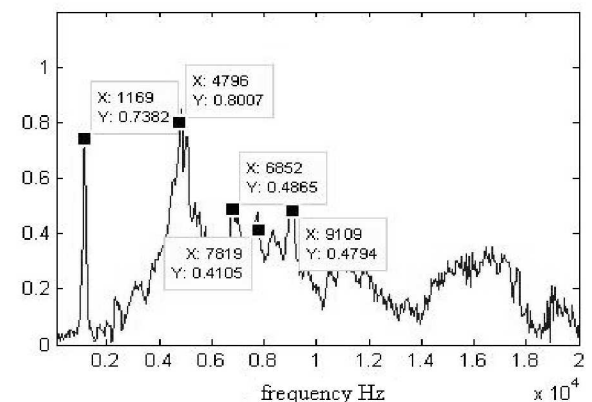


Figure 8: Spectral pattern in the column with visual cracks. X is frequency value and Y relative amplitude.

CONCLUSIONS

The use of impact echo method is presented in the restoration of ashlar - calcareous rocks columns in Old Havana. The performance of the method is good enough for this purpose. It is recommended to increase the use of IEM in other restoration materials like wood.

ACKNOWLEDGEMENTS

This work was supported by projects PNCB 10/2004, CITMA, Cuba, SUCODIC-CYTED, and Cuba-México CONACYT program.

[1] M. Sansalone, W. B. Streett, *Impact-Echo: Nondestructive Testing of Concrete and Masonry*, (Bulbrier Press, Jersey Shore, 1997).

[2] M. J Sansalone, Y. Lin, D. Pratt, C. Cheng, in *ACI Interna-*

tional Conference on Evaluation and Rehabilitation of Concrete Structures and Innovations in Design, edited by V. M. Malhotra (American Concrete Institute, Hong Kong, 1991).

[3] J. P. Wouters, J. E. Peterson; K. Kesner, R. W. Poston, *Concrete International*, **21**, 23 (1999).

[4] N. T. Carino, in *2001 Structures Congress & Exposition*, edited by P. C. Chang (American Society of Civil Engineers, Washington, D.C., 2001).

[5] O. Abraham, P. H. Cote. Método de Impacto-Eco para la detección de huecos en los conductos de pretensado. *Bulletin des laboratoires des Ponts et Chaussées*, 239 (2002).

[6] J. E. Weiss. *La arquitectura colonial cubana: siglos XVI al XIX*, (Instituto Cubano del Libro, La Habana, 1996).

[7] T. Baldewick. *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control* **42**, 99 (1995).

[8] P. V. S. Suryanaryana, P. V. S. Kurmanath, C. Subbiah and K. Viswanath, in *16th WCNDT 2004 - World Conference on NDT* (Montreal, 2004).

[9] O. C. Zienkiewicz and R. L. Taylor, *El Método de los Elementos Finitos. Mecánica de sólidos y fluidos. Dinámica y no linealidad*. 4th Ed. (MacGraw-Hill, Madrid, 1995).

DIFUSIÓN DE ÁTOMOS DE Ar EN SUPERFICIES DE MgO(100)

DIFFUSION OF Ar ATOMS ON MgO(100) SURFACES

J. GONZÁLEZ-MANTECÓN^a, S. MIRET-ARTÉS^b Y G. ROJAS-LORENZO^{at}

a) Facultad de Ciencias y Tecnologías Nucleares, InSTEC, La Habana. german@instec.cu[†]

b) Instituto de Física Fundamental, CSIC, Madrid.

[†] autor para la correspondencia

Se presenta un estudio de la difusión de átomos de Ar adsorbidos sobre una superficie de MgO(100). Este se realiza aplicando una dinámica molecular disipativa. Se resuelve la ecuación de Langevin y se introducen dos fuentes de ruido: blanco gaussiano y blanco de disparo. Se presenta el efecto de la interacción de la superficie con los adsorbatos a través de dos superficies de energía potencial: plana y corrugada. El valor del coeficiente de difusión calculado está en correspondencia con la data experimental reportada en la literatura.

We present a study of the diffusion of Ar atoms adsorbed on a surface of MgO(100). This work was done by applying a dissipative molecular dynamics scheme. It is solved the Langevin equation and there are introduced two sources of noise: white Gaussian and white shot noises. The influence of the surface adsorbate interaction is shown through two potential energy surfaces: flat and corrugated. The calculated diffusion coefficient value is in agreement with the experimental data found in the literature.

PACS: Diffusion of adsorbates 68.43.Jk, Adsorbates on surfaces 68.43.-h, Statistical mechanics of adsorbates 68.43.De, Neutron scattering 61.05.fg

INTRODUCCIÓN

Los procesos atómicos y moleculares que tienen lugar en la interfaz gas-superficie ocurren frecuentemente en la atmósfera terrestre y el medio interestelar, así como en un sinnúmero de procesos tecnológicos e industriales. Entre estos últimos destacan la fricción, la catálisis heterogénea, la lubricación, la corrosión y el crecimiento de cristales, por citar algunos ejemplos.

El estudio de las interacciones entre gases nobles y diferentes minerales, está en el centro de numerosas investigaciones que tienen como objetivo comprender una amplia gama de procesos, que van desde la dinámica del manto hasta la formación de la atmósfera de la Tierra [1, 2, 3]. El óxido de magnesio (MgO) es un conocido catalizador y un compuesto fundamental de numerosos minerales encontrados bajo la superficie terrestre, por lo que se ha utilizado como sistema modelo para comprender los procesos que ocurren en la interfaz con los materiales oxidados [4, 5].

Un sistema de gran interés es el compuesto por átomos de argón (Ar) adsorbidos en una superficie de MgO. Sobre dicho sistema existe una amplia data experimental, la que ha sido obtenida aplicando diferentes técnicas, entre ellas la Dispersión Cuasielástica de Neutrones (QENS, siglas en inglés) [6]. La mayoría de los tratamientos teóricos aplicados para interpretar los resultados de la QENS no consideran la perturbación que las partículas de prueba (neutrones) puedan inducir en el proceso de difusión, pues asumen que la interacción de estas con las especies adsorbidas y la superficie metálica es insignificante. Hasta donde conocemos, existen escasos estudios teóricos

sobre la difusión de átomos de Ar en una superficie de MgO. A partir de una metodología desarrollada para el estudio de la difusión de átomos de Na sobre una superficie de Cu [7, 8, 9], nos proponemos analizar este proceso en átomos de Ar sobre una superficie de MgO, así como comparar los resultados con la data experimental encontrada en la literatura [10].

MATERIALES Y MÉTODOS

La relación entre el número de átomos adsorbidos y el número de "sitios" en la superficie por unidad de área, define el recubrimiento θ . Para "bajos" recubrimientos las interacciones entre adsorbatos pueden ser ignoradas permitiendo trabajar dentro de la aproximación de un adsorbato. En este caso, la difusión (o auto-difusión) se caracteriza considerando solo la interacción adsorbato-substrato. Dicha interacción suele ser descrita mediante un modelo que asume dos contribuciones fundamentales: (1) la determinista, dada por el potencial V , que presenta la interacción a $T=0$, y (2) la estocástica, dada por una fuerza aleatoria, $R_G(t)$ (ruido blanco gaussiano), que resulta de los efectos vibracionales inducidos por la temperatura sobre los átomos de la superficie.

En las situaciones en que los recubrimientos se consideren "altos", la interacción adsorbato-superficie se describe al igual que en los casos de bajos recubrimientos. Sin embargo, la interacción adsorbato-adsorbato ya no es despreciable. Un enfoque alternativo para la descripción de dicha interacción, es a través de un modelo puramente estocástico denominado

aproximación de un adsorbato interactuante [7, 8, 9]. Las colisiones adsorbato-adsorbato son descritas mediante el ruido blanco de disparo [11].

En los experimentos de QENS la magnitud que se determina es el denominado coeficiente diferencial de reflexión $\mathcal{R}(\Delta\mathbf{K}, \omega)$

$$\frac{d^2 \mathcal{R}(\Delta\mathbf{K}, \omega)}{d\Omega d\omega} = n_d \mathcal{F} S(\Delta\mathbf{K}, \omega). \quad (1)$$

Este coeficiente es proporcional a la probabilidad que tienen los neutrones de ser dispersados al interactuar con los átomos adsorbidos, bajo un determinado ángulo sólido Ω , con un intercambio de energía $\hbar\omega = E_f - E_i$ y momento lineal transferido (paralelo a la superficie) $\Delta\mathbf{K} = \mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i$. En la ecuación (1), n_d es la concentración de átomos adsorbidos, $\mathcal{F}$ es el factor de forma atómica, dependiente del potencial de interacción entre el haz de neutrones y los adsorbatos que se depositan sobre la superficie y $S(\Delta\mathbf{K}, \omega)$ es el factor de estructura dinámico o ley de dispersión. Este suministra información acerca de la estructura y dinámica de los adsorbatos, y en particular aquella correspondiente a los picos Q y T . El pico cuasielástico Q es atribuido a la difusión de los adsorbatos y el pico T , de menor intensidad, se origina por el movimiento traslacional “frustrado” de los adsorbatos y por la excitación de fonones superficiales (temperatura de la superficie) [12].

El factor de estructura dinámico se expresa como

$$S(\Delta\mathbf{K}, \omega) = \int I(\Delta\mathbf{K}, t) e^{-i\omega t} dt, \quad (2)$$

donde

$$I(\Delta\mathbf{K}, t) = \int G(\mathbf{r}, t) e^{i\Delta\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad (3)$$

es la función de dispersión intermedia. La función de correlación de pares $G(\mathbf{r}, t)$ representa la probabilidad media de encontrar una partícula, que puede ser la misma u otra, en la posición $\mathbf{r} = (x, y)$ de la superficie en el instante de tiempo t .

Note de las ecuaciones (2) y (3) que el factor de estructura dinámico es la doble transformada de Fourier de la función $G(\mathbf{r}, t)$. La función de dispersión intermedia también puede presentarse como

$$I(\Delta\mathbf{K}, t) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{j,j'} e^{-i\Delta\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_j(0)} e^{i\Delta\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_{j'}(t)} \right\rangle. \quad (4)$$

En la ecuación (4) los “brackets” denotan el promedio de las trayectorias de las partículas, N es la cantidad de partículas adsorbidas y $\mathbf{r}_j(t)$ la trayectoria de la j -ésima partícula sobre la superficie. En los estudios de dinámica molecular el incremen-

to del recubrimiento de adsorbatos impone la obtención de potenciales que describan las interacciones entre las especies adsorbidas. Su costo computacional es alto debido al tiempo invertido por los códigos en la evaluación de las fuerzas entre partículas, siendo necesario el empleo de un modelo estocástico simple y realista. Este modelo consiste en analizar la dinámica de un único adsorbato. Bajo esta premisa, la acción de las restantes $N-1$ especies adsorbidas se reemplaza por una fuerza aleatoria descrita por el ruido blanco de disparo. Con esta aproximación la ecuación (4) se transforma en

$$I(\Delta\mathbf{K}, t) = \langle e^{-i\Delta\mathbf{K}[\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0)]} \rangle = \langle e^{-i\Delta\mathbf{K} \int_0^t \mathbf{v}(t') dt'} \rangle, \quad (5)$$

la variable $\mathbf{v}(t')$ en el integrando de la ecuación (5) denota la velocidad de la partícula adsorbida.

Para determinar $S(\Delta\mathbf{K}, \omega)$ a partir de (2) es necesario simular la dinámica de un adsorbato. Para ello empleamos la formulación de Langevin [13], donde el movimiento de un adsorbato es sometido a la acción de dos fuentes de ruido. La acción de los adsorbatos y de la temperatura del sustrato sobre la trayectoria de un átomo de argón puede ser bien descrita por una ecuación generalizada de Langevin cuya forma es,

$$\ddot{x}(t) = - \int_0^t \eta(t-t') \dot{x}(t') dt' + F[x(t)] + \delta R(t). \quad (6)$$

En la ecuación (6), x es la coordenada del adsorbato, $\eta(t)$ es la función de memoria del baño térmico, que incluye los efectos que surgen del ruido blanco gaussiano y del ruido blanco de disparo; $F = -\nabla V$ es la fuerza determinista por unidad de masa (V es el potencial periódico de la superficie con período a) y $\delta R(t) = \delta R_G(t) + \delta R_S(t)$ es la fuente de ruido (G y S se refieren al ruido blanco gaussiano y al ruido blanco de disparo respectivamente). En la notación anterior se utiliza el símbolo δ para representar magnitudes que fluctúan.

El ruido blanco gaussiano satisface dos condiciones: el promedio de la fuerza estocástica en un instante de tiempo es $\langle \delta R_G(t) \rangle = 0$, y la función de autocorrelación de dicha fuerza es distinta de cero para instantes de tiempo muy pequeños $\langle \delta R_G(t) \delta R_G(t') \rangle = 2m\gamma k_B T \delta(t-t')$, donde m es la masa del adsorbato, T es la temperatura de la superficie, γ el coeficiente de fricción que caracteriza la fuerza de las interacciones adsorbato-sustrato y $\delta(t-t')$ es la función delta de Dirac. Por otra parte, el ruido blanco de disparo considera la fuerza como $\delta R_S(t) \equiv R_S(t) - \langle R_S \rangle$ donde $\langle R_S \rangle \equiv \sum_K P_K(T) \langle R_S(t') \rangle_T$. Los “brackets” dobles en la última expresión indican el promedio sobre el número de colisiones (K) según cierta distribución (P_K) y el tiempo total considerado (T). En nuestro modelo $R_S(t) \equiv \sum_{k=1}^K b_k(t-t_k)$, donde $b_k(t-t_k) = c_k \lambda' e^{-\lambda'(t-t_k)}$ representa el pulso o forma del impacto, con $t-t_k > 0$ y c_k es la intensidad del mismo. La forma del pulso indica que las colisiones son “repentinas” y que sus efectos se relajan exponencialmente a una velocidad constante λ' . La probabilidad de que ocurran K colisiones durante un tiempo T se describe por la distribución de Poisson $P_K(T) = (\lambda T)^K e^{-\lambda T} / (K!)$. En la ecuación anterior λ es el

coeficiente de fricción que, para este tipo de ruido, representa el número promedio de colisiones por unidad de tiempo. En un modelo más realista las colisiones ocurren aleatoriamente con diferentes orientaciones y energías. A partir de los esquemas propuestos en la literatura se presentan los coeficientes c_k que se distribuyen según la ley exponencial $g(c_k) = \alpha^{-1} e^{-c_k/\alpha}$, donde $c_k = 0$ y $\alpha = \sqrt{m/k_B T}$ [7, 8, 9].

La velocidad λ' define el tiempo de decaimiento para cada evento colisional como $\tau_c = 1/\lambda'$. Si τ_c es relativamente pequeño, en comparación con el tiempo de relajación del sistema (régimen markoviano), la función de memoria en (6) es local en el tiempo y $\eta(t-t') \approx \eta_0 \delta(t-t')$, donde η_0 es un coeficiente de fricción independiente del tiempo. Considerando esta aproximación y aplicando el Teorema de Fluctuación-Disipación se obtiene que $\eta_0 = \gamma + \lambda$. En estas condiciones la ecuación del movimiento se plantea de la siguiente forma

$$\ddot{x}(t) = -\eta_0 \dot{x}(t) + F[x(t)] + \delta R(t) \quad (7)$$

donde podemos definir λ como el coeficiente de fricción que se relaciona con el acoplamiento adsorbato-adsorbato.

A partir de las soluciones de la ecuación (7) se encuentran dos regímenes en el comportamiento de los desplazamientos cuadráticos medios. Cuando $\eta_0 t \ll 1$, las colisiones tienen una rara ocurrencia y el adsorbato presenta un movimiento casi libre. Este es el régimen balístico o de libre difusión que se caracteriza por la ecuación

$$\langle x^2(t) \rangle \sim \frac{k_B T}{m} t^2. \quad (8)$$

Por otra parte, para $\eta_0 t \gg 1$ no existe difusión libre, los efectos de la fuerza estocástica son dominantes y predomina solamente el régimen difusivo

$$\langle x^2(t) \rangle \sim \frac{2k_B T}{m\eta_0} t = 2Dt. \quad (9)$$

La ecuación (9) es la llamada ley de Einstein. Analizando dicha ecuación se aprecia que una disminución de la fricción que actúa sobre el adsorbato, conduce a que el proceso de difusión sea más rápido (el coeficiente de difusión D aumenta). Por otro lado, la difusión es más activa cuando se incrementa la temperatura de la superficie.

Para estimar el valor de λ se considera la teoría cinética elemental de transporte de los gases. En estas condiciones la difusión es proporcional al camino libre medio, el cual es inversamente proporcional a la densidad de las partículas de gas y al área efectiva de colisión cuando se asume un modelo de esferas rígidas. Tomando como base la teoría de Chapman-Enskog y la ley de Einstein es posible encontrar la siguiente asociación $\lambda = (6\rho\theta/a^2)\sqrt{k_B T/m}$, donde ρ es el radio del adsorbato y a la longitud de la celda unidad. Este método es razonable en nuestro sistema cuando los recubrimientos son bajos.

En las simulaciones fueron consideradas dos superficies de energía potencial (SEP) diferentes: plana ($V = 0$) y corrugada [$V = f(x, y)$].

Detalles de la simulación. El primer paso de la simulación es la generación de las condiciones iniciales. Las mismas se obtienen de establecer posiciones aleatorias en el plano xy y velocidades que satisfacen la distribución de Maxwell-Boltzmann para la temperatura a la que se desea realizar el experimento numérico. A partir de estas condiciones iniciales se propagan las diferentes trayectorias numéricas. La convergencia de los resultados se obtuvo para 10000 trayectorias. El paso de integración utilizado fue de 100 a.u.

Se utilizan dos valores diferentes para el recubrimiento $\theta = 0.8$ y $\theta = 1.16$, a la temperatura de la superficie metálica $T = 45$ K. Los valores de a y ρ para la longitud de la celda unidad de la superficie y el radio atómico del argón fueron $a = 2.98$ Å y $\rho = 0.71$ Å, respectivamente. Se determinó la frecuencia de colisión (o fricción debida a los adsorbatos que colisionan) para cada uno de los juegos de datos. Los valores de λ obtenidos a la temperatura de 45 K son 9.0042×10^{-6} a.u. y 1.3056×10^{-5} a.u. para los recubrimientos de 0.8 y 1.16 respectivamente. A la velocidad de relajación de las colisiones se le asignó el valor reportado en la literatura $\lambda' = 10^{-3}$ a.u. (41.3 ps $^{-1}$) [7]. Variaciones del valor de este parámetro, incluso en órdenes de magnitud, no condujeron a cambios significativos en los resultados. A pesar de que trabajamos con recubrimientos de 0.8 y 1.16, aplicamos la teoría cinética elemental de transporte de los gases como un punto de partida en nuestro modelo, que puede ser mejorado.

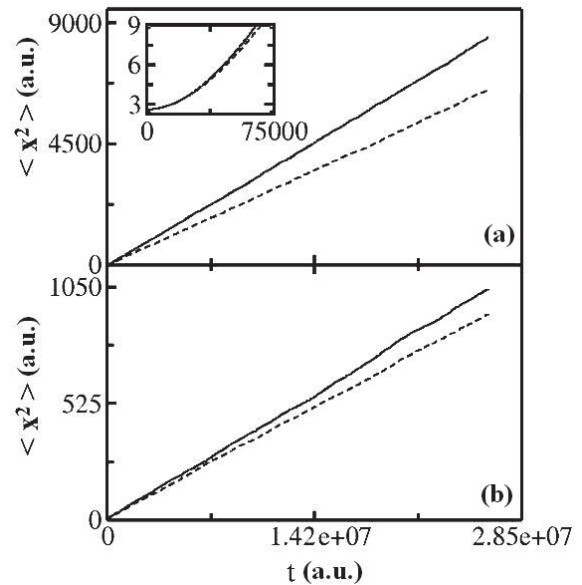


Figura 1. Desplazamiento cuadrático medio con las SEP plana (a) y corrugada (b). Los valores de los parámetros de la simulación son $\theta = 0.8$ (línea continua), $\theta = 1.16$ (línea discontinua) y $T = 45$ K.

Para determinar el coeficiente de fricción (γ) fue utilizada la relación $\gamma = 0.1\omega_0$ [7, 14], donde ω_0 es la frecuencia armónica asociada al mínimo del potencial periódico que describe las interacciones superficie-adsorbato.

En la literatura no se encontró reporte alguno sobre el potencial en el que evolucionan los átomos de Ar al interactuar con los átomos de la superficie de MgO, por lo que se propuso un potencial numérico utilizando la aproximación de potenciales aditivos por pares. Los parámetros utilizados fueron tomados de las bases de datos de BIOSYM [15]. Nos referiremos en lo adelante a este potencial como “la SEP numérica”.

Partiendo del conocimiento de las posiciones de los máximos y mínimos, y de las profundidades de los pozos de la SEP numérica, se propuso una función analítica periódica que reproduce las condiciones de dicha superficie

$$\begin{aligned} V(x, y) &= V_1(x, y) + V_2(x, y) \\ V_1(x, y) &= \frac{V_{01}}{2} \left[-\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) - \cos\left(\frac{2\pi}{a}y\right) \right] \\ V_2(x, y) &= \frac{V_{02}}{2} \left[-\cos\left(\frac{2\pi}{a}x_1\right) - \cos\left(\frac{2\pi}{a}y_1\right) \right], \end{aligned} \quad (10)$$

donde $x_1 = x + a/2$, $y_1 = y + a/2$, $V_{01} = 15.0 \text{ meV}$ y $V_{02} = 1.0 \text{ meV}$.

Posteriormente, para calcular ω_0 , se hallaron las proyecciones de ambas SEPs (numérica y analítica) en los planos zx y zy determinándose que las frecuencias ω_x y ω_y son iguales a ω_0 y su valor es $4.00 \times 10^{-5} \text{ a.u.}$ Esta frecuencia es dos órdenes de magnitud menor que la frecuencia de Debye del sólido de MgO, lo que define dos escalas temporales en nuestro problema. El movimiento de los átomos de Ar transcurre en intervalos de tiempo mucho menores que los que caracterizan al movimiento de los átomos de la red. Despreciando cualquier solapamiento de la frecuencia característica del movimiento de los átomos de Ar sobre la superficie con las bandas vibracionales permitidas en el sólido, asumimos que el movimiento de dichos átomos desde un sitio de adsorción a otro no produce una relajación apreciable de la red hacia nuevas posiciones de equilibrio. Las fluctuaciones de la red las simulamos a través del ruido blanco gaussiano. La simulación se realiza sobre el plano xy y la celda computacional es ilimitada. Se utiliza una función potencial periódica.

La ecuación de Langevin resultante (ecuación (7)), con la forma asumida para la superficie de energía potencial Ar/MgO (ecuación (10)), admite una solución analítica (a través de la ecuación de Fokker-Planck correspondiente) cuando el recubrimiento es bajo y se puede despreciar la interacción entre adsorbato [16, 17, 18]. Sin embargo, dicha metodología no es aplicada en este trabajo.

RESULTADOS

En un primer momento se analiza la difusión del adsorbato en una SEP plana, que es semejante al estudio de un gas bidimensional. Este ejemplo es representativo de las superficies poco corrugadas donde el papel de la barrera de activación es despreciable. Posteriormente se estudia el problema pero considerando una SEP corrugada.

En todos los gráficos de esta sección las magnitudes están dadas en unidades atómicas.

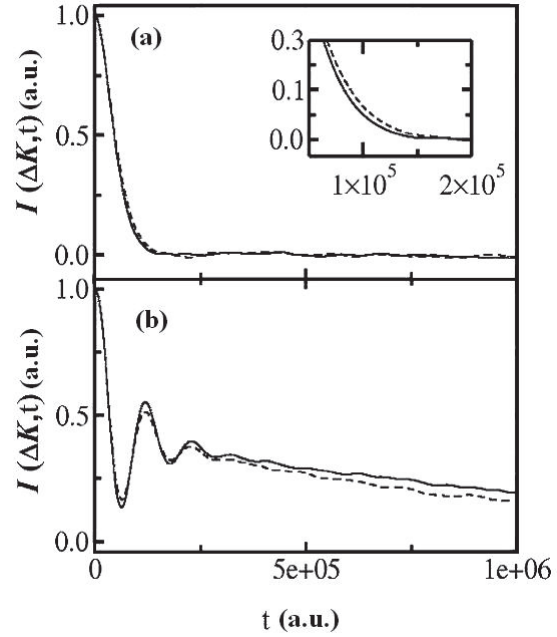


Figura 2. Función de dispersión intermedia con las SEP plana (a) y corrugada (b). Los valores de los parámetros de la simulación son $\theta = 0.8$ (línea continua), $\theta = 1.16$ (línea discontinua), $T = 45 \text{ K}$ y $\Delta K = 1.2 \text{ Å}$.

Cuando $V = 0$, es posible distinguir los regímenes balístico y difusivo para la magnitud dinámica $\langle x^2 \rangle$. Esto se aprecia en la figura 1(a) donde $\langle x^2 \rangle$ es proporcional a t^2 (balístico) para pequeños valores de tiempo y proporcional a t (difusivo) para intervalos temporales grandes. Cuando se tiene en cuenta la acción del potencial de interacción adsorbato-superficie solamente se establece el régimen difusivo, ver Fig. 1(b).

A partir del comportamiento lineal que experimenta $\langle x^2 \rangle$ se calculan los coeficientes de difusión con ayuda de la ecuación (9). En los resultados presentados en la figura 1 pueden observarse dos aspectos relevantes. Por una parte, al pasar de una SEP plana a una SEP corrugada (incremento de γ) se manifiesta una disminución del coeficiente de difusión. Además, independientemente de la SEP que se utilice para el análisis, un incremento del recubrimiento (aumento de λ) conduce también a una disminución del coeficiente de difusión. Lo común en ambos casos es el incremento de η_0 , ya sea por un aumento del acoplamiento adsorbato-superficie o del acoplamiento adsorbato-adsorbato. Estos resultados están en concordancia con la proporcionalidad inversa que expresa la ecuación (9) para los coeficientes de difusión y de fricción.

Los valores calculados para los coeficientes de difusión, utilizando una SEP plana, fueron $D = 1.62 \times 10^{-4} \text{ a.u.}$ para $\theta = 0.8$ y $D = 1.25 \times 10^{-4} \text{ a.u.}$ para $\theta = 1.16$. El tiempo de tránsito del régimen balístico al difusivo fue $t = 63745 \text{ a.u.}$ (1.54 ps) para un recubrimiento de $\theta = 0.8$, mientras que para $\theta = 1.16$ se obtuvo $t = 50660 \text{ a.u.}$ (1.23 ps).

Los coeficientes de difusión D , calculados en el problema que presenta una SEP corrugada, tomaron los valores $1.98 \times 10^{-5} \text{ a.u.}$ y $1.76 \times 10^{-5} \text{ a.u.}$ para θ igual a 0.8 y 1.16 respectivamente.

En el experimento, el coeficiente de difusión fue obtenido para un recubrimiento de $\theta = 0.8$ a la temperatura de 45 K [10]. Su valor fue $D = (2.59 \pm 0.86) \times 10^{-5} \text{ a.u.}$. A partir de los cálculos numéricos el valor obtenido fue $D = (1.98 \pm 0.08) \times 10^{-5} \text{ a.u.}$ La incertidumbre de la determinación experimental de D permite plantear que el valor del coeficiente obtenido numéricamente está en buena concordancia con el resultado empírico.

Con el objetivo de verificar la relación $\gamma = 0.1\omega_0$ se realizaron diferentes simulaciones, las que consistieron en variar el parámetro γ desde 10^{-9} a.u. hasta $14.5 \times 10^{-6} \text{ a.u.}$, manteniendo constante ω_0 . En cada una de estas simulaciones se calculó el coeficiente de difusión y se observó que, con el aumento de la fricción, dicho coeficiente experimenta un decrecimiento proporcional a $1/\gamma$ en concordancia con la ley de Einstein. Todos los valores de D fueron del mismo orden de magnitud.

El valor del coeficiente de fricción γ que asegura en la simulación un coeficiente de difusión igual al reportado en el experimento es $\gamma = 10^{-6} \text{ a.u.}$, lo que provoca una desviación del 25 % con respecto al utilizado en el modelo. La sobreestimación del valor del coeficiente de fricción podría estar relacionada con la "calidad" de la SEP utilizada en las simulaciones. Esta SEP no considera las contribuciones de los términos de muchos cuerpos y no tiene en cuenta los procesos electrónicos (energía de correlación electrónica, fricción electrónica, etc.).

En los cálculos que se desarrollaron se exploraron diferentes valores de transferencia de momento ΔK considerando el rango comprendido entre $0.53 \text{ \AA}^{-1}$ y $1.28 \text{ \AA}^{-1}$ de acuerdo con el experimento [10]. Las simulaciones se hicieron teniendo en cuenta que la transferencia de momento lineal ocurre a lo largo de las direcciones cristalográficas [100] y [110]. Sin embargo, no se encontraron diferencias relevantes en los resultados que se obtienen para ambas direcciones. Por este motivo, solamente se mostrarán los que se alcanzan siguiendo la dirección cristalográfica [100]. Este comportamiento de los resultados no se halló en la difusión de átomos de sodio sobre una superficie de cobre.

Esta situación puede explicarse a partir de las características de las SEPs. En el sistema Na/Cu(100), la diferencia entre las amplitudes de los cortes de la SEP en las direcciones [100] y [110] es de 35.0 meV, mientras que para el sistema Ar/MgO(100) esta diferencia es de 7.0 meV.

En la figura 2 se presenta la función de dispersión intermedia que se obtuvo para ambas SEPs, a la temperatura requerida y para los recubrimientos empleados en el

experimento. En la Fig. 2 (a), SEP plana, es posible observar que, para tiempos pequeños, la función $I(\Delta K, t)$ tiene un decaimiento inicial gaussiano. A medida que el tiempo aumenta presenta un decaimiento exponencial, hasta que alcanza un valor constante y muy próximo a cero. Al igual que en la ref. [3], en la que se analiza la difusión de Na en Cu(100), para el sistema Ar/MgO(100) el aumento del recubrimiento provoca que el decaimiento de $I(\Delta K, t)$ sea más lento. Este comportamiento se debe a que existe una mayor fricción de la partícula con el resto de los adsorbatos (incorporados a través del ruido blanco de disparo). Por esa razón, disminuye la velocidad de los adsorbatos, disminuye su desplazamiento medio y, de acuerdo a la ecuación (5), la función $I(\Delta K, t)$ decrece suavemente.

Con la presencia de la superficie de energía potencial corrugada se observa que la función $I(\Delta K, t)$ sufre un decaimiento más lento que cuando se utiliza la SEP plana, ver Fig. 2 (b). En este caso aparece un régimen oscilatorio como consecuencia de las interacciones de los adsorbatos con los átomos de la superficie. El incremento de la fricción con la superficie provoca una disminución de la energía de los adsorbatos. En estas condiciones el recorrido libre medio disminuye y la función de dispersión intermedia decae luego de varias oscilaciones, ver Fig. 1 (b).

En la figura 3 se introduce el factor de estructura dinámico. Es posible apreciar en esa figura la presencia del pico cuasielástico Q . Este brinda información sobre el proceso de difusión. Se distingue en el gráfico que para un menor recubrimiento, el proceso de difusión es más activo cuando la SEP es plana (Fig. 3 (a)). Sin embargo, cuando la SEP es corrugada, se observa un comportamiento contrario. La difusión es más activa para el mayor recubrimiento, ver Fig. 3 (b). Estos resultados fueron también obtenidos y discutidos en el sistema Na/Cu(100). La presencia de la SEP corrugada provoca importantes cambios en el factor de estructura dinámico. En primer lugar, las trayectorias de los átomos de Ar confinados en los mínimos de la SEP, originan dos picos simétricos alrededor del pico cuasielástico, los picos del modo T . En la figura 3 (c) se presenta el pico T (sólo se muestra el que está a la derecha del pico cuasielástico). En segundo lugar, el pico Q es más estrecho que el correspondiente al estudio de la SEP plana. Esta reducción del ancho del pico Q está en correspondencia con la disminución que experimenta el coeficiente de difusión. Los picos T se relacionan con el llamado movimiento traslacional frustrado y con el intercambio de fonones con la superficie. Un elemento a considerar en la disminución del valor del coeficiente de difusión y en la aparición de los picos T , es el hecho de que al aumentar la fricción aumenta la probabilidad de que adsorbatos queden termalizados en los pozos de la SEP. Estas partículas tendrán un movimiento restringido (traslacional frustrado) y no contribuirán al incremento de $\langle x^2 \rangle$. En estas condiciones la difusión debe ser menos activa.

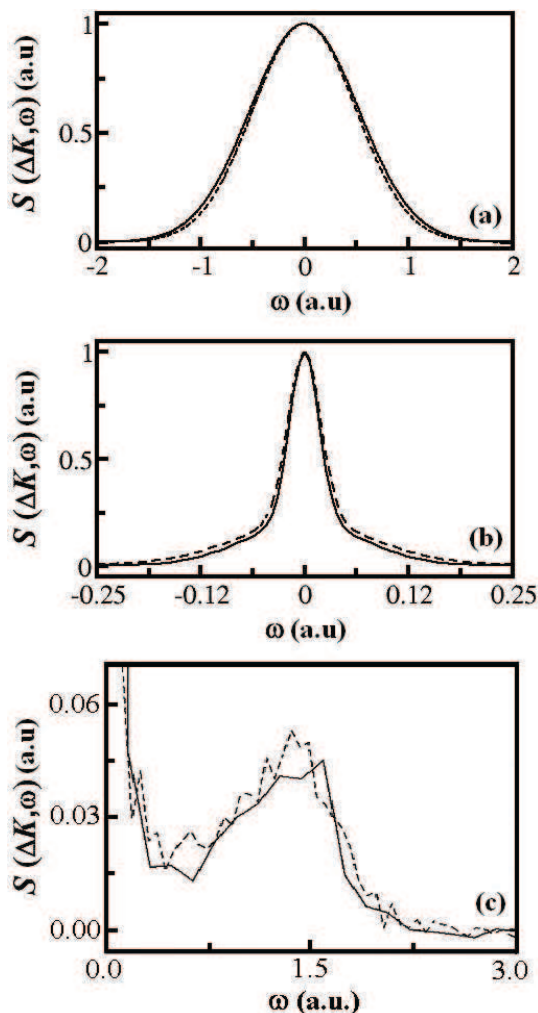


Figura 3: Factor de estructura dinámico con las SEP plana (a) y corrugada (b). En (c) se representa el pico T que aparece al utilizar la SEP corrugada. Los valores de los parámetros de la simulación son $\theta = 0.8$ (línea continua), $\theta = 1.16$ (línea discontinua), $T = 45$ K y $\Delta K = 1.2$ Å.

CONCLUSIONES

Se estudió la acción del potencial de interacción entre los átomos adsorbidos y la superficie, evidenciándose que su presencia provoca una notable variación en las propiedades dinámicas del sistema. Cuando se realiza el análisis con la SEP plana, se distinguen dos regímenes: balístico y difusivo. Con la SEP corrugada se aprecia solamente el régimen difusivo, además de una disminución del coeficiente de difusión respecto a la SEP plana.

El potencial de interacción provocó el estrechamiento del pico cuasielástico Q y la aparición de los modos traslacionales (picos T).

El incremento del recubrimiento provoca que aumente la fricción y, por tanto, que disminuya el coeficiente de difusión.

Se calculó el coeficiente de difusión para el sistema Ar/MgO.

Su valor es $D = (1.98 \pm 0.08) \times 10^{-5}$ a.u. y está en concordancia con el valor obtenido en el experimento $D = (2.59 \pm 0.86) \times 10^{-5}$ a.u.

AGRADECIMIENTOS

Javier González-Mantecón agradece las discusiones realizadas con el profesor MSc. Ernesto Luis Quintas. Este trabajo ha sido apoyado por el Ministerio de Ciencia e Innovación (España) bajo los proyectos FIS2007-02461 y SB2006-0011 y por el Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (Cuba) con el proyecto "Estudio físico-químico de sistemas atómicos y moleculares con interés para el medio ambiente."

- [1] Z. Du, N. L. Allan, J. D. Blundy, J. A. Purton and R. A. Brooker, *Geochim. et Cosmochim. Acta* **72**, 554 (2008).
- [2] L. Martin, C. Crespos, P. Larrègaray, J. C. Rayez, D. Conte and B. van Oetegem, *Chem. Phys. Lett* **471**, 136 (2009).
- [3] L. Martin, C. Crespos, P. Larrègaray, J. C. Rayez, D. Conte and B. van Oetegem, *J. Chem. Phys.* **132**, 204501 (2010).
- [4] M. I. McCarthy, G. K. Schenter, C. A. Scamehorn, and J. B. Nicholas, *J. Phys. Chem.* **100**, 16989 (1996).
- [5] B. Ealet, J. Goniakowski and F. Finocchi, *Phys. Rev. B* **69**, 195413 (2004).
- [6] G. R. Kneller, "Quasielastic Neutron Scattering", Centre de Biophysique Moléculaire, CNRS, France, 2004.
- [7] R. Martínez-Casado, J. L. Vega, A. S. Sanz and S. Miret-Artés, *J. Phys.: Condens. Matter* **19**, 305002 (2007).
- [8] R. Martínez-Casado, J. L. Vega, A. S. Sanz and S. Miret-Artés, *Phys. Rev. E* **75**, 051128 (2007).
- [9] S. Miret-Artés and E. Pollak, *J. Phys.: Condens. Matter* **17**, 4133 (2005).
- [10] J. M. Layet, M. Bienfait, C. Ramseyer, P. N. M. Hoang, C. Girardet and G. Coddens, *Phys. Rev. B* **48**, 9045 (1993).
- [11] C. W. Gardiner, *Handbook of Stochastic Methods*, (Springer-Verlag, Berlin, 1983).
- [12] R. Guantes, J. L. Vega and S. Miret-Artés, *J. Chem. Phys.* **119**, 2780 (2003).
- [13] R. Zwanzig, *Nonequilibrium Statistical Mechanics*, (Oxford University Press, New York, 2001).
- [14] A. P. Graham, F. Hofmann, J. P. Toennies, L. Y. Chen and S. C. Ying, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 3900 (1997).
- [15] Base de datos: Biosym forcefield 1, PCFF/FRC, 1993.
- [16] G. Wahnström, *Surf. Sci.* **164**, 449 (1985).
- [17] G. Wahnström, *Phys. Rev. B* **33**, 1020 (1986).
- [18] L. L. Rasmussen and C. Nyeland, *Chem. Phys. Lett.* **346**, 187 (2001).

ALGORITMOS DE TRANSMISIÓN DE MENSAJES EN EL FERROMAGNÉTICO DE ISING BIDIMENSIONAL

MESSAGE-PASSING ALGORITHMS FOR THE BIDIMENSIONAL ISING FERROMAGNET

E. DOMÍNGUEZ[†], A. LAGE Y R. MULET

Cátedra de Sistemas Complejos Henri Poincaré y Departamento de Física Teórica, Facultad de Física, Universidad de La Habana, CP 10400 Habana, Cuba. eduardo@sica.uh.cu[†]

[†] autor para la correspondencia

La técnica de los algoritmos de transmisión de mensajes permite aproximar la energía libre -y el resto de las magnitudes termodinámicas-, de sistemas discretos de espines. El ferromagnético de Ising bidimensional (FIB) es un sujeto de pruebas ideal para ilustrar el funcionamiento de los algoritmos *Belief Propagation* (BP) y *Generalized Belief Propagation* (GBP) así como la relación de estos con un método de la física estadística llamado *Cluster Variation Method* (CVM). La relativa sencillez del FIB facilita comparar los resultados obtenidos en diferentes aproximaciones de los algoritmos con un cálculo variacional exacto de la energía libre correspondiente (Bethe, Kikuchi, campo medio, etc).

Message-passing algorithms are exploited to find approximated solutions for discrete spin systems. Many thermodynamic quantities can be obtained, often accurately, by this method. The Ising bidimensional ferromagnet (FIB) is a good trial system used here to test different approximations. We compare algorithmic results with analytic calculations to illustrate the matching between the algorithms named *Generalized Belief Propagation* (GBP) and a family of free energy variational approximations called *Cluster Variation Method* (CVM).

PACS: Ising model magnetic ordering, 75.10.Hk; Statistical mechanics of phase transitions in model systems, 64.60.De; Information theory entropy in, 89.70.Cf

INTRODUCCIÓN

Un resultado fundamental de la física estadística de los sistemas en equilibrio a temperatura $T = \beta^{-1}$, es que la distribución de probabilidad de los microestados $\vec{\sigma} \in S$ es la conocida distribución de Boltzmann

$$p(\vec{\sigma}) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(\vec{\sigma})} \quad (1)$$

donde $H(\vec{\sigma})$ es la energía del estado -que se supone conocida y fácil de calcular-. La constante de normalización Z es la llamada función de partición y se calcula según

$$Z = \sum_{\vec{\sigma} \in S} e^{-\beta H(\vec{\sigma})} \quad (2)$$

Los diferentes momentos de la distribución (1) permiten determinar los valores medios de las variables del sistema, las susceptibilidades, etc. Además, por medio de la función de partición se hallan los diferentes potenciales termodinámicos, y así toda la fenomenología del problema. Formalmente entonces puede decirse que en la ecuación (2) está contenida toda la información relevante del sistema en equilibrio.

Sin embargo, el cálculo exacto de Z , o de las distribuciones marginales de probabilidad, es posible solamente en un

número muy reducido de casos ya que, en general, la suma por todos los estados del sistema no se puede hallar analíticamente. Para la inmensa mayoría de los sistemas el tamaño del espacio de configuraciones, $|S|$, crece exponencialmente con el número de variables (partículas, entes) que lo componen, por lo cual se hace imposible realizar un cálculo exhaustivo de Z .

Como resultado de una fructífera interrelación entre la física estadística, la optimización computacional y la teoría de la información, han surgido métodos y enfoques alternativos. Se ha desarrollado una amplia gama de algoritmos de inferencia que permiten estimar las distribuciones de probabilidad de las diferentes variables de un sistema [1, 2, 3]. Una clase muy importante la constituyen los algoritmos de transmisión de mensajes.

Nuestro propósito fundamental es ilustrar el uso de estos algoritmos de transmisión de mensajes así como su íntima conexión con la física estadística. En particular nos interesa el algoritmo *Generalized Belief Propagation* (GBP) y su relación con un método de la física estadística conocido como *Cluster Variation Method* (CVM) [4, 5]. Aplicamos los algoritmos mencionados a un modelo muy

estudiado pero interesante como sujeto de pruebas: el sistema ferromagnético de Ising bidimensional (FIB). Este es uno de los pocos sistemas discretos no triviales que posee solución exacta conocida [6, 7]. Además, su relativa sencillez permite comparar los resultados de los métodos algorítmicos con los obtenidos mediante el CVM y con valores exactos de las diferentes magnitudes estimadas.

Para precisar, consideraremos una red cuadrada bidimensional de N espines $\sigma_i = \pm 1$ (ver figura (1)), que interactúan con sus primeros vecinos según el hamiltoniano

$$E(\vec{\sigma}) = -\sum_{\langle ij \rangle} J \sigma_i \sigma_j \quad \text{con } J > 0 \quad (3)$$

donde J es la constante que caracteriza la intensidad de las interacciones entre espines y la suma se realiza por todos los pares de primeros vecinos. Se consideran condiciones de frontera periódicas. Es conocido que FIB exhibe una transición de fase de segundo orden de un estado paramagnético a ferromagnético a una temperatura $T \approx 2.2692 J$ para campo externo nulo [6, 7]. Mediante una aproximación de campo medio puede explicarse cualitativamente la presencia de esta transición, pero el valor de la temperatura crítica obtenido ($T_c = 4.0 J$) está lejos del resultado exacto. Esto es consecuencia de que dicha aproximación es particularmente mala en sistemas de dimensión finita y donde el orden local y la geometría son relevantes. En este trabajo se aplican las aproximaciones de Bethe y CVM, que sí tienen en cuenta la estructura del sistema, para obtener mejores resultados.

Para organizar la exposición se ha dividido el resto del trabajo en cinco partes o secciones. La primera sección presenta informalmente las ideas relativas al CVM, poniendo énfasis en su implementación en el FIB. Se propone un método variacional para aproximar la energía libre total, y así evitar el cálculo exhaustivo de Z . Seguidamente, se describe el algoritmo GBP y se plasman las ecuaciones que lo caracterizan. Este algoritmo es uno de los medios para enfrentar el cálculo propuesto en la sección anterior. En la sección siguiente se desarrolla, de manera exacta, el cálculo variacional propuesto. Se explica el papel de la simetría en la simplificación del proceso. Los principales resultados obtenidos por sendos métodos -algorítmico y variacional- se exponen en la última sección. Las gráficas que se muestran subrayan la correspondencia entre ambos. De forma breve se mencionan propiedades de la dinámica del algoritmo GBP. Por último se esbozan, a modo de resumen, las conclusiones.

DESCRIPCIÓN DEL MÉTODO CVM

La energía libre variacional de un sistema se define como un funcional de la distribución de probabilidades de los estados

$$F[p(\vec{\sigma})] = U[p(\vec{\sigma})] - TS[p(\vec{\sigma})]$$

De acuerdo con los postulados de la física estadística se deduce que la distribución $p(\vec{\sigma})$ real es aquella que minimice $F[p]$. La minimización de esta energía libre es un problema computacional al menos tan difícil como el cálculo de la función de partición. La idea del CVM, propuesto por Kikuchi, es minimizar una magnitud F_{Kik} que aproxime a F pero que haga los cálculos más asequibles. Para definir F_{Kik} se divide el sistema en regiones y se suma la contribución a la energía libre de cada una. El aporte de cada región depende de la distribución local de probabilidades de las variables de esta. Como consecuencia, se transforma la minimización por el espacio de las distribuciones globales de probabilidad a la minimización en el espacio de las distribuciones locales.

Con más precisión, en el CVM se divide la red en un conjunto de regiones maximales que constituyan un cubrimiento, es decir, que no quede ningún enlace ni espín fuera de región. Cada una de las regiones maximales debe contener algunos espines y todos los enlaces entre estos, por ejemplo, en la red cuadrada una región puede ser un cuadrado de 2×2 espines, incluyendo los enlaces que los "cierran". A este tipo de regiones de 2×2 le llamaremos plaquetas, ver figura (2). Un conjunto maximal sería el conjunto de todas las plaquetas posibles de la red.

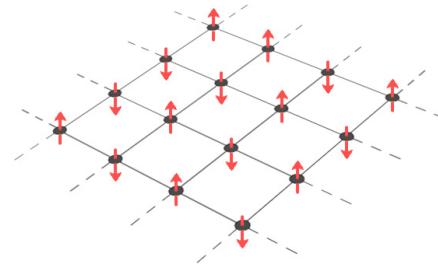


Figura 1. Red bidimensional de espines binarios.

Es evidente que las regiones tienen que solaparse entre sí, puesto que no debe quedar ningún enlace fuera del cubrimiento. Con los elementos compartidos entre dos regiones primarias podemos formar otra región; por ejemplo, dos plaquetas contiguas se solapan en dos espines y un enlace común; a esta región la llamaremos enlace. Al conjunto inicial de regiones le añadimos el conjunto formado por todas las intersecciones posibles, esto es, en nuestro ejemplo, adicionar al conjunto de todas las plaquetas, el conjunto de todos los enlaces. El proceso se repite añadiendo las intersecciones de las intersecciones y así sucesivamente hasta que ya no sea posible continuar. Mediante esta sencilla regla se genera el conjunto de regiones utilizado en el CVM. En el caso de que se comience con regiones maximales del tipo plaqueta, se tendrán al final regiones plaqueta, enlace y espín (como intersección de los enlaces). La aproximación obtenida si las regiones maximales son del tipo enlace se llama aproximación de Bethe.

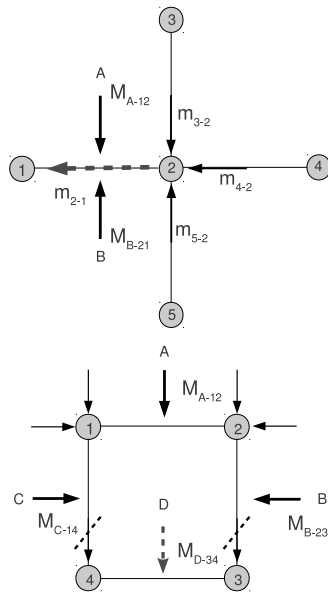


Figura 2. Representación esquemática del cálculo de los mensajes. El mensaje actualizado aparece en líneas discontinuas.

A cada región definida se le asocia una energía media U_R y una entropía S_R de la manera usual mediante las ecuaciones (5) y (6). La energía E_R está determinada por las interacciones que queden dentro de la región, por ejemplo a una plaqueta le corresponde la energía de cuatro enlaces; también debe considerarse la interacción de los espines con un posible campo externo h . La interacción con este campo se tendría en cuenta mediante un término aditivo de la forma $E_i = -h\sigma_i$ para cada espín. En este trabajo consideramos siempre el campo externo nulo. No obstante, hay que señalar que el cálculo propuesto para el CVM es posible también en el caso de un campo externo homogéneo. El algoritmo GBP (que veremos más adelante) es capaz de lidiar incluso con un campo externo desordenado.

$$U_R[p_R] = \sum_{\vec{\sigma}_R} p_R(\vec{\sigma}_R) E_R(\vec{\sigma}_R) \quad (5)$$

$$S_R[p_R] = - \sum_{\vec{\sigma}_R} p_R(\vec{\sigma}_R) \ln p_R(\vec{\sigma}_R) \quad (6)$$

$$\vec{\sigma}_R = (\sigma_i, \sigma_j, \dots, \sigma_l) \text{ con } i, j, \dots, l \in R.$$

En las ecuaciones anteriores p_R es la distribución de probabilidades de las variables que componen la región. Para la energía libre queda, naturalmente

$$F_R[p_R] = U_R[p_R] - T S_R[p_R] \quad (7)$$

Por último, la energía libre total del sistema en la aproximación de Kikuchi será la suma de la energía libre de cada región, multiplicada por un coeficiente c_R que tenga en cuenta el solapamiento entre regiones.

$$F_{Kik} = \sum_{R \in \mathcal{R}} c_R F_R \quad (8)$$

De esta manera se pretende aproximar la energía libre real por los aportes a ella de cada región. Este procedimiento es exacto para la energía total; siempre se puede escribir como la suma de la energía de cada región. Para la entropía, sin embargo esta última afirmación no es cierta en general. En muy pocos casos la entropía total es la suma de las entropías locales [3].

El método CVM puede parecer similar a una aproximación de campo medio, sin embargo existe una diferencia notable. La aproximación de campo medio propone una forma manejable, generalmente factorizable, de la distribución de probabilidades global para el cálculo de la energía libre. Puede demostrarse que la energía libre de campo medio obtenida es una cota superior del valor exacto. Por otro lado, el CVM no utiliza ni permite construir una distribución de probabilidades global a partir de las distribuciones locales. Por esta causa, el valor de F_{Kik} no es una cota superior del valor real de F .

Resumiendo, lo que interesa en el CVM es determinar la distribución de probabilidades de cada región de forma que se extreme la F_{Kik} . A primera vista este podría parecer un problema igual de formidable que el original pero, afortunadamente, aquí es donde entran los algoritmos de transmisión de mensajes a jugar su papel.

ALGORITMO GBP EN LA APROXIMACIÓN DE KIKUCHI

En la sección anterior vimos cómo se plantea el cálculo aproximado de la energía libre en términos de las distribuciones locales de probabilidad que extremen cierto funcional. En general, la minimización directa es un problema complicado, dada la no convexidad del funcional de interés (8).

En el ámbito de las ciencias de la computación se desarrollaron los algoritmos de transmisión de mensajes como herramienta que permite realizar cálculos de inferencia de las distribuciones de probabilidad locales de las variables en un grafo o red. Estas distribuciones son las que se necesitan para aproximar la energía libre de cada región. A continuación se describe las magnitudes fundamentales y las ecuaciones que rigen a estos algoritmos.

En cada región del sistema -definida previamente mediante el CVM- se definen dos conjuntos de magnitudes fundamentales: *beliefs* (opiniones) y mensajes. El *belief* de una región, $b_R(s_R)$, representa una especie de aproximación a la distribución real de probabilidades de cada estado de los espines contenidos en la región. Los mensajes son pedazos de información que las regiones intercambian en aras de “coordinar” sus opiniones. El algoritmo consiste en la propagación de los mensajes por la red, mediante ciertas reglas, hasta que se alcance un “consenso” (estabilidad). Este es el motivo del nombre *Generalized Belief Propagation*. Los algoritmos de transmisión de mensajes se han aplicado con buenos resultados en diferentes problemas, ofreciendo una solución aproximada en un tiempo corto en comparación con otros procedimientos[3].

La razón de este éxito no se pudo aclarar completamente hasta que se descubrió la equivalencia de este método con la minimización de la energía libre de las regiones. Se puede demostrar que cuando el algoritmo converge, lo hace a un mínimo local de la energía libre correspondiente [5, 8]. La función de los mensajes es equivalente a la de ciertos multiplicadores de Lagrange que surgen en el proceso de minimización. Las ecuaciones de iteración constituyen un método de punto fijo para calcular estos multiplicadores. Por otro lado, es importante destacar que la calidad de la solución depende de la estructura del sistema; por ejemplo, es conocido que para una red que no presente ciclos, la inferencia es exacta. Para sistemas con ciclos de larga longitud los resultados son igualmente satisfactorios. La aplicación del GBP en una red cuadrada bidimensional ha de ser cautelosa debido a la presencia de ciclos cortos. Los resultados obtenidos deben considerarse siempre una aproximación. Se considera una buena práctica el incluir en las regiones maximales al menos los ciclos más cortos del sistema.

En la aproximación de Kikuchi se definen tres tipos de regiones: plaqueta, enlace y espín. Los mensajes que se intercambian son de dos tipos, de plaqueta a enlace $m_i(\sigma_i)$ y de enlace a espín $M_{ij}(\sigma_i, \sigma_j)$. Cada una de las regiones construye su *belief* en función de los mensajes que le llegan de las regiones adyacentes.

El valor del *belief* del espín i será proporcional al producto de los mensajes que “entran” a este desde los otros espines

$$b_i(\sigma_i) \propto \prod_{j \in N(i)} m_{j \rightarrow i}(\sigma_i) \quad (9)$$

aquí $N(i)$ representa el conjunto de todos los vecinos del espín i . La fórmula anterior nos dice que un espín determina la probabilidad de estar en un estado u otro en dependencia de la información que recibe de sus primeros vecinos en la red. El *belief* para un enlace se calcula según

$$b_{ij}(\sigma_i, \sigma_j) \propto e^{-\beta J \sigma_i \sigma_j} \prod_{n \in N(i) \setminus j} m_{n \rightarrow i}(\sigma_i) n \times \prod_{n \in N(j) \setminus i} m_{n \rightarrow j}(\sigma_j) n \times \prod_{M_k \in P(\langle i, j \rangle)} M_k(\sigma_i, \sigma_j) \quad (10)$$

donde $P(\langle i, j \rangle)$ es el conjunto de los mensajes que las plaquetas vecinas le envían al enlace $\langle i, j \rangle$.

De la misma manera se escribe una ecuación para la plaqueta donde intervienen los mensajes de plaquetas vecinas hacia los enlaces internos M_p , así como mensajes de los enlaces vecinos a los espines internos $m_{n \rightarrow p}$

$$b_{ijkl}(\sigma_i, \sigma_j, \sigma_k, \sigma_l) \propto e^{-\beta H(\sigma_i, \sigma_j, \sigma_k, \sigma_l)} \prod_{M_p \in U} M_p(\mathbf{s}_p) \times \prod_{a \in \{ijkl\}} \prod_{n \in N(a), \{ijkl\}} m_{n \rightarrow a}(\sigma_a). \quad (11)$$

En la ecuación (11) el conjunto U está formado por todos los mensajes provenientes de las plaquetas vecinas

El hamiltoniano “local” no es otra cosa que

$$H(\sigma_i, \sigma_j, \sigma_k, \sigma_l) = -J(\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_k + \sigma_k \sigma_l + \sigma_l \sigma_i).$$

Las ecuaciones usadas para calcular los *belief* tienen una estructura similar en todas las regiones. Siempre se trata del producto de un factor de Boltzmann y un conjunto de mensajes externos. De esta forma se logra un balance entre las interacciones internas y el exterior de cada región.

Sobre el conjunto de magnitudes definidas anteriormente se impone una serie de restricciones que garantiza su consistencia. Primeramente se exigen condiciones de normalización para cada región

$$\sum_{\mathbf{s}_R} b(\mathbf{s}_R) = 1.$$

Además, es necesario que el *belief* de cada región sea congruente con el de las subregiones que contiene; por ejemplo, al sumar por las variables σ_k, σ_l , debe cumplirse que

$$\sum_{\sigma_k, \sigma_l} b(\sigma_i, \sigma_j, \sigma_k, \sigma_l) = b(\sigma_i, \sigma_j). \quad (12)$$

Este tipo de condición se llama de “marginalización”.

Cada una de las ecuaciones genera relaciones auto-consistentes que ligan a todos los mensajes entre si. Esas son las ecuaciones que se resuelven iterativamente pasando mensajes de región en región.

Como hay dos tipos de mensajes en la aproximación de Kikuchi, se tienen dos tipos de ecuaciones diferentes; a cada uno de los mensajes de la red le corresponde una diferente. La forma de la ecuación (13) aparece representada esquemáticamente en la parte superior de la figura 2,

$$m_{2 \rightarrow 1}(\sigma_1) \propto \sum_{\sigma_2} e^{\beta J \sigma_1 \sigma_2} M_{A \rightarrow 12} M_{B \rightarrow 21} m_{3 \rightarrow 2} m_{4 \rightarrow 2} m_{5 \rightarrow 2} \quad (13)$$

$$M_{D \rightarrow 34} \propto \sum_{1,2} f(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4) M_{A \rightarrow 12} M_{B \rightarrow 23} M_{C \rightarrow 41} \times \frac{m_{A \rightarrow 1} m_{A \rightarrow 2} m_{B \rightarrow 2} m_{C \rightarrow 1}}{m_{1 \rightarrow 4} m_{2 \rightarrow 3}}, \quad (14)$$

donde

$$f(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4) = e^{\beta J(\sigma_4 \sigma_1 + \sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3)}.$$

Para implementar en la práctica el algoritmo se definen las estructuras de datos convenientes y se programan las ecuaciones de iteración (13) y (14) en todas las regiones de un sistema $L \times L$. Los mensajes se inicializan aleatoriamente y se actualizan al azar hasta que la variación relativa tras cada iteración sea inferior a 10^{-5} .

Hemos descrito ya la esencia del método CVM y del algoritmo GBP que corresponde a la misma selección de regiones. En esta sección se realiza el cálculo variacional exacto de la energía libre en la aproximación de Kikuchi para el FIB. Se parametrizan las distribuciones de probabilidad de cada región y se extrema la energía libre en el espacio de los parámetros.

Explotando las propiedades de simetría del sistema podemos parametrizar la energía libre mediante un conjunto reducido de magnitudes y luego proceder a su minimización. Para una plaqueta arbitraria proponemos una función de la forma

Explotando las propiedades de simetría del sistema podemos parametrizar la energía libre mediante un conjunto reducido de magnitudes y luego proceder a su minimización. Para una plaqueta arbitraria proponemos una función de la forma

$$b_p(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4) = \frac{1}{16} \left(1 + m \sum_{i=1}^4 \sigma_i + r \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + k(\sigma_1 \sigma_3 + \sigma_2 \sigma_4) + s \sum_{\langle ijk \rangle} \sigma_i \sigma_j \sigma_k + t \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \right),$$

de la cual se deduce, tras marginalizar por las variables adecuadas, que

$$b_{ij}(\sigma_i, \sigma_j) = \frac{1 + m(\sigma_i + \sigma_j) + r\sigma_i \sigma_j}{4}$$

$$b_i(\sigma_i) = \frac{1 + m\sigma_i}{2}$$

Mediante un cálculo muy sencillo puede demostrarse que m es igual a $\langle s \rangle$, es decir, la magnetización por espín. También se ve que $r = \langle s_i s_j \rangle$, es la correlación entre espines vecinos. La forma propuesta para las distribuciones de probabilidad es general dada la simetría del sistema. Un elemento clave es que estamos suponiendo que las distribuciones son las mismas para todas las regiones del mismo tipo y que el sistema es homogéneo e isotrópico. Esta simetría es la llave para la simplificación del cálculo, que de otra forma habría de considerar una distribución diferente para cada región del sistema, como pasa en los sistemas desordenados.

Si ahora escribimos la energía, entropía y energía libre intensiva del sistema en función de estas distribuciones de probabilidad, obtendremos una parametrización de la energía libre mediante las magnitudes m, r, s, k, t . Utilizando las ecuaciones (5)-(8) se obtiene la F_{Kik} parametrizada.

Es importante notar que la ecuación (8) da la energía libre extensiva del sistema; basta dividir esta magnitud (y todas las extensivas) por N , el número de espines de la red, para obtenerlas en su forma intensiva.

Los coeficientes R que aparecen en (8) para cada región son[5]

- Plaqueta: $c_p = 1$, no es subregión de ninguna región definida.
- Enlace: $c_E = 1 - 2 = -1$, cada enlace pertenece a dos plaquetas.
- Espín: $c_s = 1 + (-4) + 4 = 1$, cada espín es subregión de cuatro enlaces y cuatro plaquetas.

La energía media de un enlace se calcula según su definición

$$U_E = - \sum_{\sigma_i, \sigma_j} J \sigma_i \sigma_j b_{ij}(\sigma_i, \sigma_j), \quad (13)$$

$$U_E = -Jr.$$

Si se considera que cada plaqueta contiene 4 enlaces y se tienen en cuenta las condiciones de marginalización, es elemental obtener que

$$U_P = \sum_{ijkl} -J(\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_k + \sigma_k \sigma_l + \sigma_l \sigma_i) b_{ijkl}(\sigma_i, \sigma_j, \sigma_k, \sigma_l), \quad (16)$$

$$U_P = 4U_E,$$

$$U_P = -4Jr.$$

De esta manera, queda para la energía intensiva total (haciendo $J=1$)

$$u_{total} = c_P U_P + 2c_E U_E, \quad (17)$$

$$u_{total} = -2r,$$

y para la entropía, muy similar

$$s_{total} = c_P S_P + 2c_E S_E + c_S S_S$$

$$S_R = - \sum_{\vec{\sigma}_R} b(\vec{\sigma}_R) \ln b(\vec{\sigma}_R) \quad \text{con } R = P, E, S \quad (18)$$

$$s_{total} = S_P - 2S_E + S_S.$$

Finalmente, la energía libre intensiva queda

$$\frac{F_{Kik}}{N} = f_{Kik} = u_{total} - T \sigma_{total}. \quad (19)$$

La minimización de $f_{Kik}(m, r, s, k, t)$ es matemáticamente sencilla, basta resolver el sistema de ecuaciones

$$\nabla_{mrskt} f_{Kik} = \vec{0} \quad (20)$$

en algún sistema de cálculo simbólico-numérico como *Mathematica*. En estas ecuaciones la temperatura entra como parámetro por lo que el resultado depende de los valores de T que se tomen. Por ejemplo, pueden tomarse equiespaciados en el intervalo $[0,4]$, que es donde se espera que ocurran fenómenos interesantes. Para cada valor de temperatura se obtienen los valores de m^*, r^*, d^* , etc., que satisfagan la condición de mínimo (20). De esta forma podemos encontrar una dependencia de estos

parámetros con la temperatura: $m^*(T)$, $r^*(T)$, $d^*(T)$, ..., $f_{Kik}^*(T)$.

RESULTADOS. ALGORITMO GBP. COMPARACIÓN

Se implementó el algoritmo BP y GBP en sistemas de 8×8 , 16×16 , 32×32 y 64×64 ; cada tamaño se corrió con 10^3 condiciones iniciales diferentes para promediar los resultados. Para cada valor de temperatura utilizado, se inicializa aleatoriamente el conjunto de mensajes y se iteran las ecuaciones (13) y (14) hasta alcanzar la convergencia. En la gráfica (3) aparece el promedio del logaritmo del tiempo de convergencia para cada tamaño. Es de interés señalar que en la vecindad de la temperatura donde ocurre una transición de fase, el tiempo que demora alcanzar la convergencia tiene un máximo, en correspondencia con el hecho de que la susceptibilidad y la longitud de correlación divergen a esta temperatura. Esto hace que las pequeñas fluctuaciones se propaguen fácilmente y que al algoritmo le cueste encontrar la solución correcta.

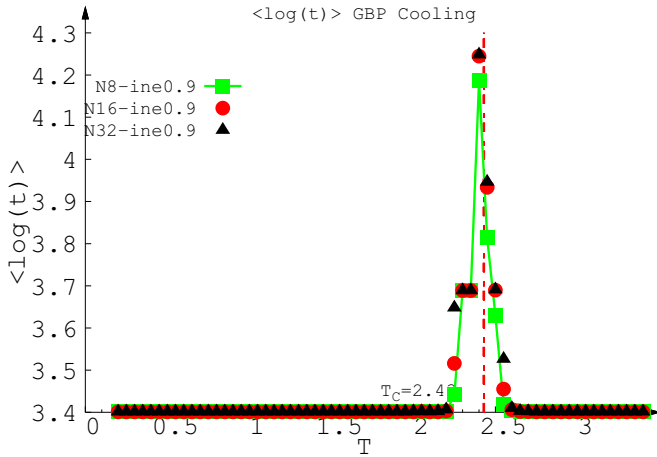


Figura 3: Logaritmo del tiempo de convergencia. Obsérvese que existe una divergencia para $T \approx 2.4J$, temperatura crítica en la aproximación de Kikuchi.

Los resultados de la magnetización, energía intensiva, entropía, etc., muestran independencia con el tamaño de la red utilizada. Esto es muy lógico, en fin de cuentas, las ecuaciones de iteración son las mismas en todos los sistemas y se obtienen siempre las mismas distribuciones de probabilidad. Las Figuras 4, 5 y 6 muestran en puntos redondos los valores obtenidos para diferentes magnitudes en dependencia de la temperatura.

En las mismas Figuras 4, 5 y 6 aparecen, en líneas continuas, las correspondientes magnitudes obtenidas por el procedimiento variacional. La coincidencia de ambos resultados es perfecta y no casual. Se ha demostrado que las distribuciones inferidas algorítmicamente se corresponden con aquellas que minimizan la energía libre en la aproximación correspondiente [5]. En la mayoría de los casos, por ejemplo en los sistemas desordenados, el cálculo variacional es imposible de realizar de la manera en que se hizo aquí. El principal motivo es que no se puede utilizar la simetría del sistema para lograr una simplificación. Los algoritmos del tipo de GBP son, en este caso, una

vía eficiente para encontrar el mínimo de F_{Kik} .

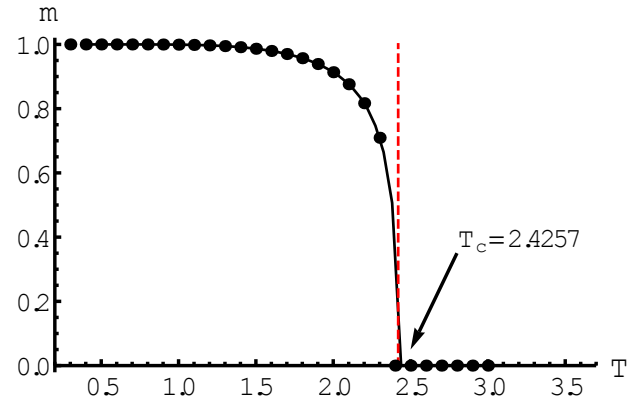


Figura 4: Magnetización vs. Temperatura. La C de transición predicha es $T_C \approx 2.426J$.

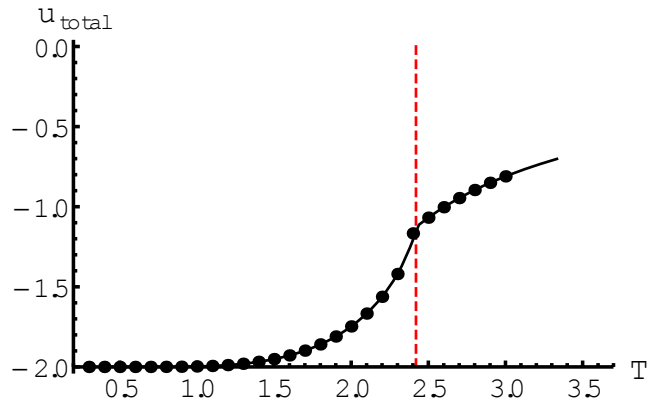


Figura 5: Energía intensiva vs. Temperatura. Como es natural, para $T \rightarrow 0$, $u_{total} \rightarrow -2$.

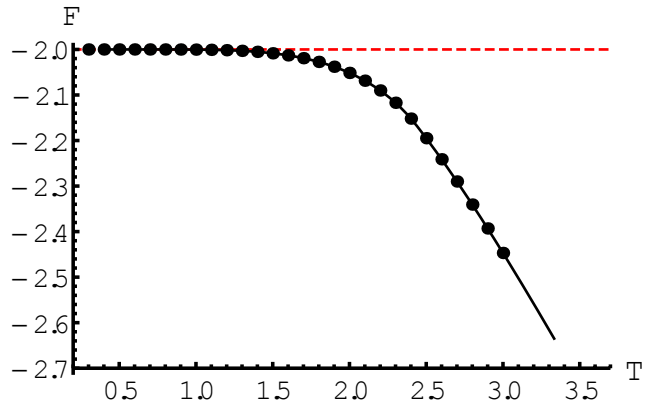


Figura 6: Energía libre vs. Temperatura. A baja temperatura tiende al valor de la energía mientras que para $T \rightarrow \infty$ tenemos que $F \rightarrow T \ln 2$.

Como se puede observar, por ambas vías se predice la existencia de una transición para-ferromagnética alrededor de una temperatura $T_C \approx 2.426J$. Este valor está mucho más cerca del correcto ($T_{Ons} \approx 2.269J$) que el obtenido mediante la aproximación de campo medio $T_{CM} \approx 4.0J$. Cuando se realizan los cálculos en la aproximación de Bethe (regiones enlace solamente), se obtienen cualitativamente los mismos

resultados, el valor de la temperatura crítica es un poco peor, $T_{Bethe} \approx 2.88J$. Si ordenamos los resultados quedaría $T_{CM} > T_{Bethe} > T_{Kik} > T_{Oms}$. Es posible seguir en esta serie de aproximaciones de modo tal que se obtengan resultados cada vez más cercanos a los exactos. Dentro del CVM podrían utilizarse como regiones primarias grupos de 3x3, 4x4, etc, espines.

En la Figura 5 se nota el cambio en la pendiente de la energía en la vecindad de C , como es característico de este tipo de transición.

CONCLUSIONES

Al utilizar la simetría del ferromagnético de Ising conseguimos realizar un cálculo exacto de su energía libre en la aproximación de CVM en condiciones de campo externo nulo. De esta manera obtuvimos un valor de la temperatura de transición que mejora la aproximación de campo medio y se acerca al exacto. Es importante señalar que el método variacional descrito es aplicable incluso con campo externo aplicado, donde no existe solución exacta conocida. Corroboramos también que existe una correspondencia exacta entre los resultados de los algoritmos de transmisión de mensajes del tipo GBP y el CVM con la correcta selección de regiones. Para el caso mucho más interesante de un sistema desordenado con interacciones $J_{ij} = \pm 1$ también se ha empleado GBP, donde permite describir una rica fenomenología [9].

Hay que mencionar que existen algoritmos de transmisión de mensajes, basados en otras ideas, que realizan la inferencia de manera exacta, por ejemplo, HAK, *Double-Loop*[1]. Sin em-

bargo estos algoritmos en general convergen más lentamente que GBP [3]. Por tanto, cuál usar para un problema específico está en dependencia del objetivo que se persiga: precisión o rapidez. También es posible utilizar algoritmos estocásticos como el método de Monte-Carlo para estimar las distribuciones marginales de probabilidad. Estos métodos estocásticos simulan la dinámica real del sistema en el espacio de configuraciones y requieren de un tiempo largo para samplearlo efectivamente. Los algoritmos vistos aquí son un artificio matemático para encontrar rápida y aproximadamente los mínimos de la energía libre; sus resultados son válidos sólo cuando convergen.

-
- [1] T. Heskes, K. Albers and H. Kappen, Proceedings of the Nineteenth Conference Annual on Uncertainty in Artificial Intelligence (UAI-03), 313–320 (Morgan Kaufmann, San Francisco, CA, 2003).
 - [2] A. L. Yuille, Neural Computation **14**, 1691 (2002).
 - [3] A. Pelizzola, J Phys A **38**, R309 (2005).
 - [4] R. Kikuchi, Phys Rev **81**, 988 (1951).
 - [5] J. Yedidia, W. T. Freeman and Y. Weiss, IT-IEEE **51**, 2282 (2005).
 - [6] L. Onsager, Phys Rev **65**, 117 (1944).
 - [7] K. Huang, Statistical Mechanics (John Wiley and Sons, 1963).
 - [8] J. S. Yedidia, W. T. Freeman and Y. Weiss, Intelligence **8**, 236 (2002).
 - [9] A. Lage, R. Mulet, E. Domínguez, T. Rizzo and F. Ricci-Tersenghi, In preparation.

INFLUENCIA DE LA ALTURA DEL CONTACTO EN LA DISTRIBUCIÓN DE TEMPERATURA Y RESISTENCIA TÉRMICA EN DIODOS LÁSER DE GaInNAs

INFLUENCE OF RIDGE HEIGHT IN THE TEMPERATURE DISTRIBUTION AND THERMAL RESISTANCE OF GaInNAs LASER DIODES

A. ABELENDA^{a†}, I. DELGADO^b Y M. SÁNCHEZ^c

a) IMRE, Universidad de La Habana, La Habana; aabelenda@imre.oc.uh.cu[†]

b) Instituto de Geofísica y Astronomía, La Habana; idelgado@iga.cu

c) Facultad de Física, Universidad de La Habana; maruchy@fisica.uh.cu

[†] autor para la correspondencia

Los diodos láser utilizados en los actuales sistemas de comunicación por fibra óptica son de GaInPAs. Estos poseen un pobre desempeño térmico por lo que se trata sustituirlos por láseres de otros materiales como GaInNAs. En este trabajo se presenta un estudio de la influencia de la altura del contacto “ridge” en la distribución de temperaturas en diodos láser de GaInNAs. Para hallar esta distribución resolvimos la ecuación de conducción del calor mediante el Método de las Diferencias Finitas y utilizando un modelo bidimensional de flujo de calor. La simulación se realizó en *Mathematica 7.0* variando: el largo del diodo, la cantidad de pozos en la zona activa y la altura del contacto tipo “ridge”. Se calculó la resistencia térmica (Rt) de los dispositivos y se comparó con resultados experimentales reportados por otros autores obteniéndose un buen acuerdo. Los resultados indican las potencialidades de los láseres de GaInNAs.

At present the laser diodes used in optical fiber communications systems are based on GaInPAs. These lasers have a bad thermal performance and promising substitutes are GaInNAs lasers. In this paper a study of influence of the ridge height on the temperature distribution in GaInNAs laser diodes is presented. To find the temperature distribution the heat conduction equation was solved using the Finite Difference Method and a two-dimensional model of heat flow. The simulation was performed in *Mathematica 7.0* varying: the length of the diode, the amount of wells in the active zone and the height of the ridge contact. The thermal resistance (Rt) of the devices was calculated and compared with experimental results reported by other authors, obtaining good agreement. Our results suggest the potential of GaInNAs lasers.

PACS: Diode lasers 42.55.Px, Computer modeling and simulation 07.05.Tp, Thermal conduction in metals and alloys and semiconductors 66.70.Df

INTRODUCCIÓN

En la actualidad los diodos láser (DL) utilizados en los sistemas de comunicación por fibra óptica están concentrados en la familia GaInPAs/InP. Sin embargo la corriente umbral de estos dispositivos presenta una alta sensibilidad térmica y poseen bajos valores de temperatura característica (T_0), del orden de 60 K, por lo que se utilizan acoplados a enfriadores que encarecen los costos de los sistemas de comunicación.

En la última década se ha trabajado intensamente en la obtención de láseres de GaInNAs como posible alternativa para obtener fuentes de luz que no necesiten sistemas de refrigeración. La heteroestructura formada por GaInNAs/GaAs presenta una mayor discontinuidad en la banda de conducción (*band offset*) que una de GaInPAs/InP, esto disminuye la posibilidad de fuga de portadores de la región activa y permite obtener altos valores de T_0 . A nivel de laboratorio se han reportado láseres de GaInNAs con valores de temperatura característica por encima de 150 K [1, 2].

En la práctica se utilizan diferentes parámetros para la caracterización térmica de los dispositivos. La resistencia térmica (Rt) es el parámetro que ofrece la caracterización más completa. Este parámetro se define como el cociente entre el incremento de temperatura (ΔT) de la zona activa (ZA) debido al paso de la corriente a través del láser, y la potencia total disipada (Pd) [3].

El valor de la Rt está fuertemente relacionado con parámetros geométricos como el ancho w y el tipo del contacto de franja [4, 5].

La mayoría de las estructuras fabricadas en la actualidad utilizan contactos de franja tipo mesa o *ridge*. La influencia del ancho y profundidad del *ridge* sobre la densidad de corriente umbral (J_{th}) y la temperatura característica en láseres de GaInNAs ha sido estudiada por Liu *et al.* en [6] y [7]. Sin embargo, no existen reportes de estudios de su efecto sobre la resistencia térmica de los dispositivos.

En este trabajo se presenta un estudio de la influencia de la profundidad del *ridge* y el número de pozos en la zona activa sobre la distribución de temperaturas y la resistencia térmica de diodos de GaInNAs/GaAs. Aplicando el Método de las Diferencias Finitas (MDF) y utilizando un modelo bidimensional de flujo de calor, resolvimos la ecuación de conducción del calor en el caso estacionario. Todos los cálculos y simulaciones fueron implementados en *Mathematica 7.0*. Los valores de Rt obtenidos se compararon con los reportados en la literatura observándose un buen acuerdo.

MODELO

Estructura láser. En la Figura 1 se esquematiza la estructura analizada. La misma consta de un sustrato de GaAs tipo *n* con metalización de AuGe sobre el que se crece una capa buffer de GaAs. La zona activa (ZA), formada por uno o varios pozos cuánticos de GaInNAs, está rodeada por barreras simétricas de GaAs para el confinamiento de los portadores. Las barreras están embebidas entre las capas *cladding* de AlGaAs tipo *n* y *p* que garantizan el confinamiento de la luz. Sobre la capa *cladding* tipo *p* se encuentra una capa p^+ de GaAs para lograr un buen contacto óhmico, y sobre esta, las capas de contacto metálico de Pt, Ti y Au.

La estructura representada corresponde a un contacto tipo *ridge*. En este tipo de láseres el contacto se define devastando una o varias capas de la estructura mediante diferentes técnicas. Se deposita una capa de SiO_2 a ambos lados del *ridge* y se depositan las capas metálicas que completan la estructura. Así el ancho del contacto se define por el ancho del *ridge*. Típicamente el ancho de este contacto varía entre 4 y 10 μm . Esto regula la inyección de corriente en una zona central, lo que permite que la luz se emita en un spot elíptico en la zona central del espejo del láser. Estos dispositivos exhiben excelentes patrones de campos lejano y cercano, con haces de forma gaussiana casi ideales lo que es importante para lograr un buen acople de la luz emitida en las fibras ópticas.

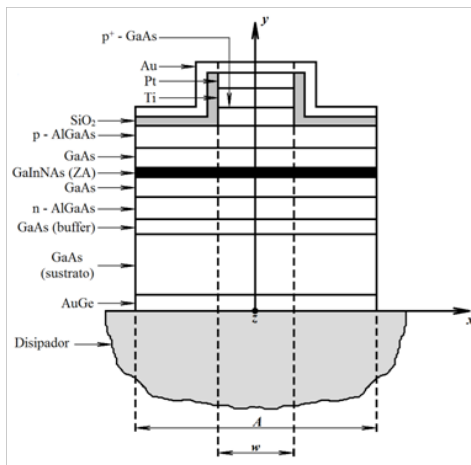


Figura 1. Corte transversal de la estructura láser con contacto tipo *ridge* en la configuración *p-up* utilizada en la simulación.

Ecuación de propagación del calor. La distribución de temperaturas $T_i(x, y, z)$ en los diferentes puntos de la estructura se puede obtener resolviendo la ecuación de conducción del calor en condiciones estacionarias y considerando la homogeneidad de las capas que la forman

$$\nabla^2 T(x, y, z) = -\frac{g(x, y, z)}{\sigma(x, y, z)} \quad (1)$$

$T(x, y, z)$ representa la temperatura en cada uno de los puntos (x, y, z) de la estructura, $g(x, y, z)$ es la densidad de calor generada en esos puntos y $\sigma(x, y, z)$ es la conductividad térmica. En la Figura 1 se indica el sistema de referencia utilizado en la solución de la ecuación (1). En este trabajo empleamos un modelo bidimensional de flujo de calor, eliminando así la dependencia de T con z . Esto constituye una primera aproximación en la solución de un problema tridimensional.

Para resolver el problema matemático que plantea la ecuación (1) debemos conocer sus condiciones de frontera. Además, la presencia de múltiples capas de diferentes materiales nos impone el uso de condiciones de continuidad del flujo de calor en el interior de la estructura. Si tenemos en cuenta que el mecanismo fundamental de extracción de calor en un DL es a través del disipador, entonces podemos decir que el flujo de calor en las paredes laterales y superiores del dispositivo es cero. Por lo tanto, para hallar la distribución de temperatura debemos resolver la expresión (1) bajo las siguientes condiciones de frontera

$$\begin{aligned} T(x, 0) &= 0 \\ \left. \frac{\partial T(x, y)}{\partial x} \right|_{x=\left\{ \begin{smallmatrix} \text{paredes} \\ \text{laterales} \end{smallmatrix} \right\}} &= 0 \quad \left. \frac{\partial T(x, y)}{\partial y} \right|_{y=\left\{ \begin{smallmatrix} \text{paredes} \\ \text{superiores} \end{smallmatrix} \right\}} &= 0 \\ \left(\sigma(x, y) \frac{\partial T(x, y)}{\partial y} \right) \Big|_{y=y_{ic}^-} &= \left(\sigma(x, y) \frac{\partial T(x, y)}{\partial y} \right) \Big|_{y=y_{ic}^+} \end{aligned} \quad (2)$$

Debido a que las dimensiones del disipador son mucho mayores que las del dispositivo y generalmente es de un material con un elevado valor de σ , podemos considerar que mantiene una temperatura constante e igual a la ambiente. En nuestro caso, fijamos la temperatura del disipador a 0 K con el objetivo obtener directamente el incremento de temperatura ΔT en los puntos (x, y) de la estructura con respecto a la temperatura ambiente.

Fuentes de calor. La fuente de calor más importante de una estructura láser se encuentra en la ZA. Consideramos que el calor generado en esta región se debe a la recombinación no radiativa (RNR), a la reabsorción de portadores libres (RPL) y al efecto Joule (EJ). La densidad de calor generada por estos mecanismos viene dada por [8]

$$g_{ZA}(x, y) = \frac{V_0}{t_{ZA}} \left[J + (J_{th} - J) \eta_D \right] + \rho_{ZA} J^2 \quad (3)$$

En esta expresión V_0 es el voltaje de la juntura *p-n*, t_{ZA} el espesor de la ZA, J la densidad de corriente que pasa por el dispositivo, J_{th} la densidad de corriente umbral, η_D la eficiencia cuántica diferencial y ρ_{ZA} la resistividad eléctrica de la ZA.

En el resto de las capas sólo consideramos el efecto Joule como fuente de generación de calor.

$$g_{capas}(xy) = \rho_{capas} \cdot J^2 \quad (4)$$

En los cálculos se considera el confinamiento ideal de la corriente en la región delimitada por el contacto, por lo que sólo se genera calor en la franja de espesor w representada en la Figura 1.

Método de las Diferencias Finitas. La base del Método de las Diferencias Finitas (MDF) es la discretización de un dominio continuo al cual se le asocia un grupo de ecuaciones diferenciales. El objetivo de esta transformación es construir un sistema de ecuaciones lineales que simplifique la solución numérica del problema. Para obtener las aproximaciones en diferencias de los operadores diferenciales utilizamos el modelo de tres puntos [9].

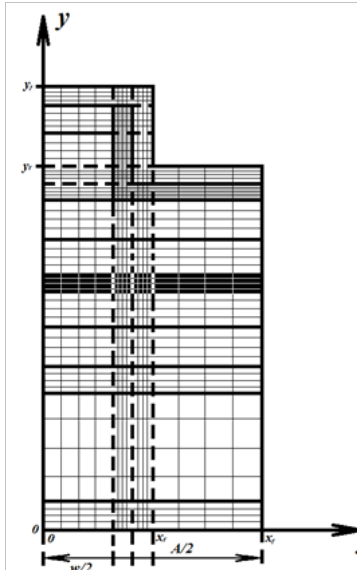


Figura 2. Discretización de la estructura láser sobre la cual realizaremos los cálculos utilizando el MDF.

En nuestro caso, el dominio sobre el cual está definido el sistema de ecuaciones formado por (1) y (2) es la estructura láser. Debido al sistema de referencia que escogimos (Figura 1) la distribución de temperaturas es simétrica respecto al eje y . Esto reduce a la mitad la cantidad de ecuaciones del sistema lineal, pero nos obliga a introducir una nueva condición de frontera

$$T(0^-, y) = T(0^+, y) \quad (5)$$

Las estructuras comerciales están formadas por capas de espesores muy diferentes entre sí y el ancho del *ridge* generalmente es mucho menor que el ancho del dispositivo. Por lo tanto, al discretizar la estructura láser, debemos asociarle una malla irregular donde las filas y las columnas de nodos no están equiespaciadas.

Si aplicamos el modelo de tres puntos a la ecuación (1) obtenmos

$$\left(\frac{T_{i-1,j}}{h_i(h_i + h_{i+1})} + \frac{T_{i,j-1}}{k_j(k_j + k_{j+1})} - \left(\frac{1}{h_i h_{i+1}} + \frac{1}{k_j k_{j+1}} \right) T_{i,j} + \frac{T_{i,j+1}}{k_{j+1}(k_j + k_{j+1})} + \frac{T_{i+1,j}}{h_{i+1}(h_i + h_{i+1})} \right) = -\frac{g_{i,j}}{2\sigma_{i,j}} \quad (6)$$

donde el subíndice i corre a lo largo del eje x y el subíndice j a lo largo del eje y , la separación entre los puntos x_{ij} y $x_{i+1,j}$ es h_i y k_i es la distancia entre los nodos x_{ij} y x_{ij+1} respectivamente. Esta expresión se corresponde con el caso más general posible y podrá ser simplificada de acuerdo con el punto (i, j) en el que estemos realizando los cálculos.

La condición de frontera correspondiente a $y = 0$ podemos escribirla de la forma

$$T_{i,0} = 0. \quad (7)$$

En tanto las condiciones de frontera para las paredes laterales y superiores podemos escribirlas de la forma

$$T_{n-2,j} - 4T_{n-1,j} + 3T_{n,j} = 0, \text{ si } \begin{cases} x = x_r \wedge y_r < y < y_f \\ x = x_f \wedge 0 < y < y_r \end{cases} \quad (8)$$

$$T_{i,m-2} - 4T_{i,m-1} + 3T_{i,m} = 0, \text{ si } \begin{cases} y = y_r \wedge x_r < x \leq x_f \\ y = y_f \wedge 0 \leq x \leq x_r \end{cases}$$

Para la condición de paridad de T , planteada en la expresión (5), podemos utilizar la ecuación (6). En este caso debemos considerar que $T_{-1,j} = T_{1,j}$ y $h_i = h_{i+1} = h$, por lo tanto obtenmos:

$$\left(\frac{T_{0,j-1}}{k_j(k_j + k_{j+1})} - \left(\frac{1}{h^2} + \frac{1}{k_j k_{j+1}} \right) T_{0,j} + \frac{T_{0,j+1}}{k_{j+1}(k_j + k_{j+1})} + \frac{T_{i+1,j}}{h^2} \right) = -\frac{g_{i,j}}{2\sigma_{i,j}} \quad (9)$$

Para las condiciones de continuidad del flujo de calor en las fronteras entre dos capas diferentes de la estructura se utilizan las expresiones

$$\left(\frac{\sigma_{i,j}}{k_j} T_{i,j-2} - 4 \frac{\sigma_{i,j}}{k_j} T_{i,j-1} + 3 \left(\frac{\sigma_{i,j}}{k_j} + \frac{\sigma_{i,j+1}}{k_{j+1}} \right) T_{i,j} - \left(4 \frac{\sigma_{i,j+1}}{k_{j+1}} T_{i,j+1} + \frac{\sigma_{i,j+1}}{k_{j+1}} T_{i,j+2} \right) \right) = 0. \quad (10)$$

Debido a la forma de la capa de óxido (Figura 1), es necesario utilizar condiciones de continuidad del flujo para fronteras horizontales en zonas determinadas. En estos casos utilizaremos una expresión similar a

la (10), donde debemos sustituir los k_j por los h_i y correr a lo largo del subíndice i en lugar del j .

Parámetros de la estructura. Para la simulación se escogió una estructura típica, similar a la reportada por Borchert *et al.* en [10] y [11]. En la Tabla I se listan los valores de: espesor (t), resistividad eléctrica (ρ) y conductividad térmica (σ), así como las fuentes de calor consideradas en cada una de las capas para una estructura con un solo pozo (SQW) en la zona activa.

Dado que el GaInNAs es un material relativamente nuevo, del cual no existen aún muchos datos en la literatura, la conductividad térmica se obtuvo por interpolación de los compuestos binarios. Para esto, utilizamos los datos reportados en [12], [13] y [14].

Para el análisis de estructuras con más de un pozo en la zona activa se consideraron barreras interpozo de GaInNAs de 20 nm de espesor con menor concentración de In (la concentración de nitrógeno se mantuvo igual a la del pozo). La composición habitual de In que se usa en las barreras es de entre 4 y 5 %. Esta diferencia con respecto a la concentración de In en la zona activa no tiene gran influencia sobre la conductividad térmica, por lo que tanto esta, como la resistividad eléctrica, se tomaron iguales a la de los pozos y se consideró que en ellas sólo se genera calor por efecto Joule.

Capa		Generación de calor	Espesor (μm)	σ (W/mK)	ρ (Ωm)
Material	Descripción				
Au	Contacto metálico	EJ	1	317	$2.3 \cdot 10^{-8}$
Pt		EJ	0.13	71.6	$1.1 \cdot 10^{-7}$
Ti		EJ	0.02	21.9	$4.3 \cdot 10^{-7}$
p^+ -GaAs	Contacto p	EJ	0.2	44	$2.6 \cdot 10^{-4}$
$p\text{-Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$	Cladding	EJ	1.5	11.4	$7.9 \cdot 10^{-3}$
GaAs	Barrera	EJ	0.15	44	$2.6 \cdot 10^{-4}$
$\text{Ga}_{0.64}\text{In}_{0.36}\text{N}_{0.018}\text{As}_{0.982}$	ZA	RNR EJ RPL	0.006	37.8	$2.5 \cdot 10^{-4}$
GaAs	Barrera	EJ	0.15	44	$9.2 \cdot 10^{-4}$
$n\text{-Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$	Cladding	EJ	1.5	11.4	$3.4 \cdot 10^{-3}$
$n\text{-GaAs}$	Buffer	EJ	1	44	$9.2 \cdot 10^{-6}$
$n\text{-GaAs}$	Substrato	EJ	100	44	$9.2 \cdot 10^{-6}$
AuGe	Contacto metálico	EJ	0.3	150	$2.4 \cdot 10^{-6}$
SiO_2	Óxido metálico	—	0.2	1.47	—

EJ – Efecto Joule
RNR – Recombinación no radiativa
RPL – Recombinación de portadores libres

Es conocido que la configuración o modo en que se coloca el dispositivo sobre el disipador tiene una gran influencia sobre la resistencia térmica [15-17]. Un DL montado en configuración $p\text{-up}$

(sustrato unido al disipador) sufrirá un calentamiento significativamente mayor que si se monta en configuración $p\text{-down}$ (contacto p unido al disipador). En nuestro caso, partiendo de una estructura en configuración $p\text{-up}$, variamos la altura del *ridge*, la cantidad de pozos y el largo del dispositivo para estudiar su influencia en la distribución de temperaturas y la Rt del láser.

Se consideraron 3 alturas del *ridge*:

- *Ridge* de altura $h1$: formado por la metalización y la capa p^+ .
- *Ridge* de altura $h2$: formado por la metalización, la capa p^+ y la *cladding*.
- *Ridge* de altura $h3$: formado por la metalización, la capa p^+ , la *cladding* y la barrera.

Para estimar la densidad de potencia en forma de calor generada en la zona activa, además de los parámetros recogidos en la Tabla I, se necesitan algunos parámetros de operación y geométricos del dispositivo. En la Tabla II se listan los parámetros utilizados en la simulación para un DL reportado en [11].

Parámetro	Valor
Largo del dispositivo (μm)	350
Ancho del dispositivo (μm)	300
Ancho del <i>stripe</i> (μm)	4
Voltaje de codo (V)	2.5
Corriente umbral (A)	0.021
Resistencia serie (W)	10
Eficiencia cuántica diferencial	0.45

RESULTADOS

Distribución de temperatura. En la Figura 3 presentamos la distribución de temperatura obtenida para un láser SQW de GaInNAs igual al esquematizado en la Figura 1. Cada gráfico corresponde a una altura del *ridge* dada. Estas gráficas muestran como el máximo calentamiento del dispositivo ocurre en la zona activa. Se puede apreciar además que con el aumento de la profundidad del *ridge* (mayor número de capas en el *ridge*), el incremento de temperatura en el dispositivo es mayor.

	ΔT (K)					
	Configuración $p\text{-up}$			Configuración $p\text{-down}$		
	r1	r2	r3	r1	r2	r3
1 QW	11.3	18.1	20.9	3.03	2.95	3.20
2 QW	21.0	33.3	38.4	5.80	5.63	6.09
3 QW	30.6	48.1	55.4	8.52	8.26	8.90

Este resultado es lógico ya que al aumentar la profundidad del *ridge* disminuye el volumen para “disipar” el calor generado en la zona activa. Esto se aprecia mejor en la Figura 4 donde se muestran los perfiles de temperatura correspondientes a los puntos de coordenadas (0, y) en la dirección perpendicular al

plano de la juntura, para este dispositivo. Aunque ha sido reportado que un contacto *ridge* donde se elimine la capa *cladding* favorece la disminución de la corriente de fuga lateral en los dispositivos [6, 7], nuestros resultados indican que en para una evacuación más eficiente del calor es recomendable la eliminación de una sola capa (la p^+ -GaAs).

Como se observa el incremento en la temperatura en la zona activa al variar de $N = 1$ a $N = 3$ es de 19.3 K. Nótese que al triplicar el número de pozos prácticamente se triplica la temperatura en la zona activa, lo que es razonable ya que estamos triplicando el número de fuentes de calor en prácticamente el mismo volumen. Esto indica que no es conveniente utilizar un número grande de pozos en la zona activa si se quiere minimizar el incremento de temperatura en el dispositivo.

A modo de comparación repetimos los cálculos para el dispositivo en la configuración *p-down*. En este caso como era de esperar el incremento de temperatura en el dispositivo es mucho menor que el obtenido en la configuración *p-up*. En la Tabla III hemos resumido los valores del incremento de temperatura (ΔT) en la zona activa para los diferentes casos simulados.

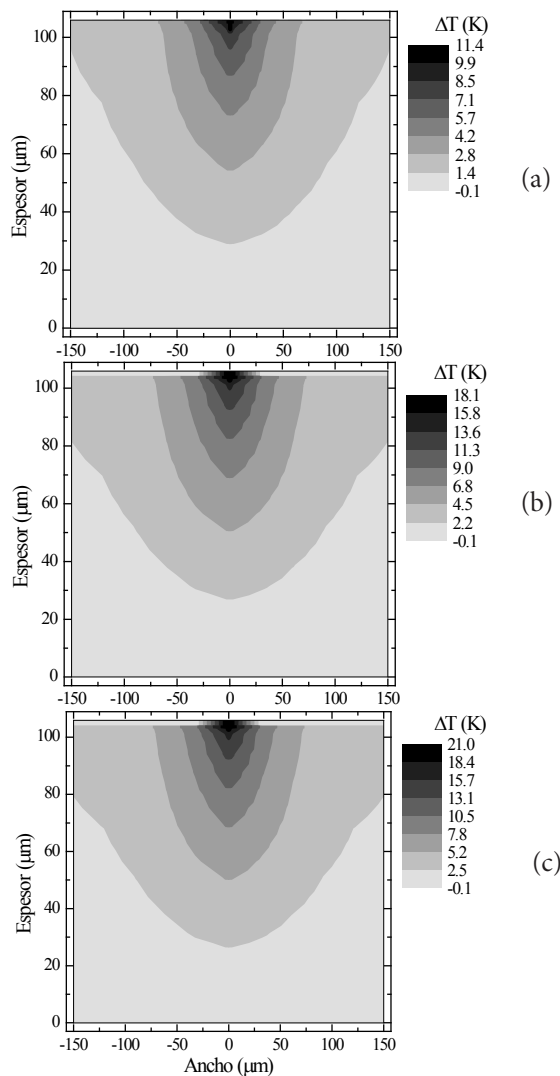


Figura 3. Distribución de temperatura para un DL SQW de GaInNAs con contacto de franja tipo *ridge* en configuración *p-up*. (a) *Ridge* de altura $h1$. (b) *Ridge* de altura $h2$. (c) *Ridge* de altura $h3$.

Para estudiar la influencia del número de pozos N , se calculó la distribución de temperaturas en función de N para un dispositivo con altura del *ridge* $h1$. En la Figura 5 se presentan los perfiles obtenidos.

Los resultados muestran que en la configuración *p-down* un dispositivo con *ridge* de altura $h2$ es el que sufre el menor incremento de temperatura. Este hecho puede estar relacionado con la presencia de la capa *cladding* p -AlGaAs fuera del *ridge*, que permite una mayor disipación del calor. Esto no ocurre en el dispositivo con igual altura de *ridge* $h2$ en configuración *p-up* porque en este caso el flujo de calor está en sentido contrario a las capas que se eliminan.

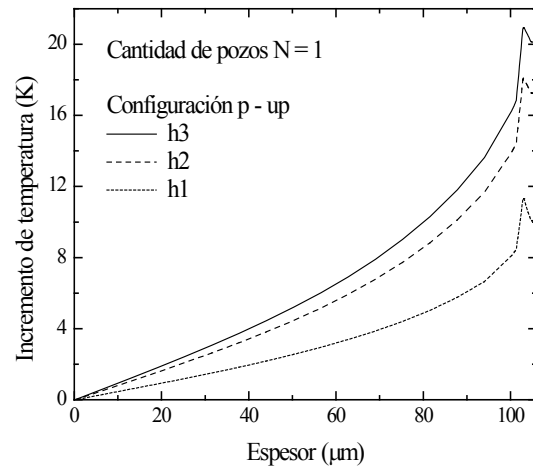


Figura 4: Perfil de temperatura en los puntos de coordenadas $(0, y)$ de un láser SQW para diferentes alturas del *ridge*.

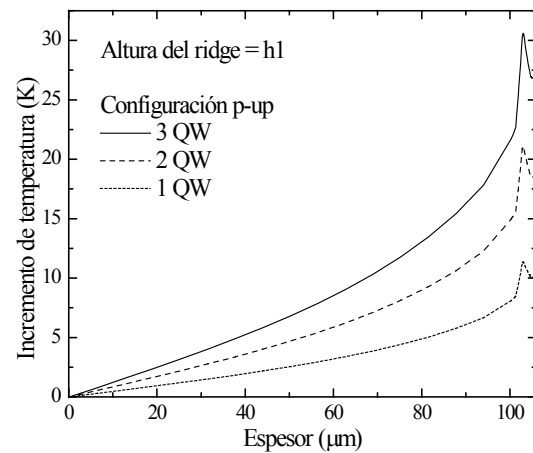


Figura 5. Perfil de temperatura en los puntos de coordenadas $(0, y)$ de un láser con altura $h1$ del *ridge* para distintas cantidades de pozos cuánticos.

Resistencia térmica de los dispositivos. Para calcular la dependencia de R_t con la altura del *ridge* y el largo del dispositivo utilizamos la expresión

$$R_t = \frac{\Delta T}{I \cdot (V_0 + R_s \cdot I)} \quad (11)$$

donde I es la corriente de operación del dispositivo tomada como 1.2 veces la corriente umbral, V_0 es el voltaje de codo, R_s la resistencia serie y ΔT el incremento de temperatura obtenido en la simulación anterior para las distintas alturas del *ridge*. En la Figura 6 se muestran los valores de R_t obtenidos para cada una de las alturas del *ridge*, consideradas para un DL de GaInNAs en la configuración *p-up* y un largo de 350 μm .

Como se observa, la resistencia térmica del dispositivo aumenta a medida que se incrementa la altura del *ridge*, en correspondencia con el incremento de temperatura que experimenta la zona activa.

En la Figura 7 presentamos las curvas de R_t en función del largo del dispositivo para dispositivos en configuración *p-up*, con altura del *ridge* h_1 y dispositivos con 1, 2 y 3 pozos en la zona activa. A modo de comparación, se incluyeron los valores de R_t calculados según el método descrito en [21] para dispositivos reportados en la literatura. Como se observa en la figura, se encontró una buena concordancia entre los resultados de la simulación y los valores experimentales, aunque no es posible hacer una comparación exacta debido a las diferencias específicas de estas estructuras con respecto a la utilizada en los cálculos.

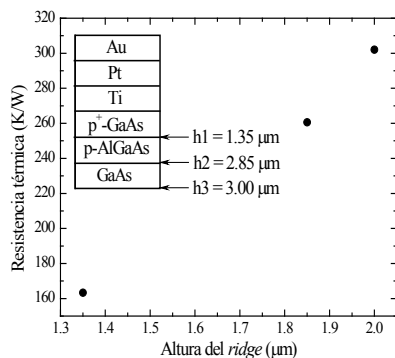


Figura 6: Gráfico de Altura del *ridge* vs. R_t para un DL de GaInNAs en la configuración *p-up* y un largo de 350 μm .

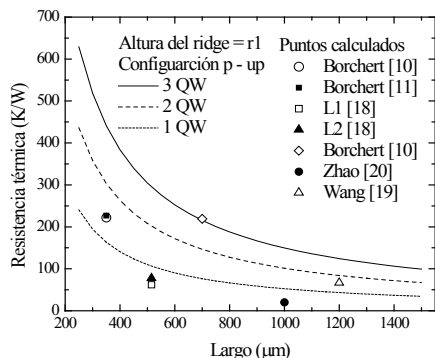


Figura 7. Gráfico de R_t vs. L para un DL de GaInNAs en la configuración *p-up* y una altura h_1 del *ridge*, y puntos experimentales calculados según el método reportado en [21].

Es importante señalar que los valores de R_t por debajo de 100 K/W , en particular el valor de 26 K/W obtenido para el dispositivo de la estructura reportada en [20], indican las potencialidades de los diodos láseres de GaInNAs como alternativa a los de GaInPAs utilizados en los actuales sistemas de comunicación por fibra óptica.

CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos muestran que el aumento de la cantidad de pozos en la zona activa conduce a un incremento significativo del calor generado y, por lo tanto, de la temperatura alcanzada por el DL. Un resultado importante es que el incremento de temperatura del dispositivo, en configuración *p-up*, es proporcional a la altura del *ridge*. Este hecho está relacionado con la disminución del volumen del dispositivo que sirve para la disipación del calor. Esto indica que para la evacuación más eficiente del calor es recomendable la eliminación de una sola capa (la p^+ -GaAs), es decir, un contacto *ridge* de altura h_1 . Estos resultados evidencian la necesidad de un proceso de optimización que incluya el efecto de todos los parámetros analizados.

En cuanto a la resistencia térmica, los valores obtenidos indican las potencialidades de los láseres de GaInNAs como alternativa a los de GaInPAs utilizados en los actuales sistemas de comunicación por fibra óptica.

- [1] M. Hopkinson, C.Y. Jin, H.Y. Liu, P. Navaretti and R. Airey, *Elect. Lett.* **42**, 923 (2006)
- [2] S. M. Wang, P. Modh, Y. Q. Wei, M. Sadeghi and A. Larsson, *Elect. Lett.* **41**, 743 (2005)
- [3] J. I. Pankove, *Optical processes in semiconductors*, (Dover Publications Inc., New York, 1971)
- [4] M. C. Amann, *Appl. Phys. Lett.* **50**, 4 (1987)
- [5] M. Yano, H. Imai, K. I. Hori and M. Takusagawa, *IEEE J. Quantum Elect.* **17**, 619 (1981)
- [6] C. Y. Liu, Y. Qu, S. Yuan and S. F. Yoon, *Appl. Phys. Lett.* **85**, 4594 (2004)
- [7] C. Y. Liu, S. F. Yoon, W. J. Fan, A. Uddin and S. Yuan, *IEEE Photonics Technol. Lett.* **18**, 791 (2006)
- [8] B. Mroziec, M. Bugajski and W. Nakwaski, *Physics of semiconductors lasers*, (PWN – Polish Scientific Publishers, Warszawa, 1991)
- [9] M. Álvarez, A. Gómez, A. Guerra y R. Lau, *Matemática numérica*, (Editorial Félix Varela, La Habana, 1998)
- [10] B. Borchert, A. Egorov, S. Illek, M. Komanda and H. Riechert, *Elect. Lett.* **35**, 2204 (1999)
- [11] B. Borchert, A. Y. Egorov, S. Illek and H. Riechert, *IEEE Photonics Technol. Lett.* **12**, 597 (2000)

- [12] R. E. Bolz and G. L. Tuve, *CRC Handbook of tables for applied engineering science*, 2nd Edition, (CRC Press, Boca Raton, 1973)
- [13] M. Levinshtein, S. Ruminatsev and M. Shur, *Handbook series on Semiconductor Parameters*, Vol. 2, (World Scientific, London, 1999)
- [14] J. C. Dymont., Y. C. Cheng and A. J. Spring Thorpe, *J. Appl. Phys.* **49**, 2683 (1975)
- [15] A. G. Steventon, R. E. Spillet, R. E. Hobbs, M. G. Burt, P. J. Fiddymont and J. V. Collins, *IEEE J. Quantum Elect.* **17**, 602 (1981)
- [16] O. J. F. Martin, G. L. Bona and P. Wolf, *IEEE J. Quantum Elect.* **28**, 2582 (1992)
- [17] W. Both and J. Piprek, *J. Therm. Anal.* **36**, 1441 (1990)
- [18] B. Messant, "Conception, réalisation et caractérisation de diodes laser InGaAsN/GaAs à diaphragme d'oxyde pour les télécommunications optiques à 1.3 μm ". Tesis de Doctorado, Laboratoire d'Analyse et d'Architecture es Systèmes du CNRS (LAAS), 2006
- [19] S. M. Wang, Y. Q. Wei, X. D. Wang, Q. X. Zhao, M. Sadeghi and A. Larsson, *J. Cryst. Growth* **278**, 734 (2005)
- [20] H. Zhao, G. Adolfsson, S. M. Wang, M. Sadeghi and A. Larsson, *Elect. Lett.* **44**, 416 (2008)
- [21] R. Pernas, A. Abelenda y M. Sánchez, *Rev. Cub. Fis.* **27**, 238 (2010)

ESTUDIO DE CERÁMICAS LIBRES DE PLOMO DEL COMPUESTO PIEZOELECTRICO



STUDY OF LEAD-FREE CERAMICS OF THE $[(K_{0.5}Na_{0.5})_{0.94}Li_{0.06}]_{0.97}La_{0.01}(Nb_{0.9}Ta_{0.1})O_3$ PIEZOELECTRIC COMPOSITE

H. H'MOK^{a,b†}, A. DUARTE^{a,b}, J. PORTELLES^{a,b}, J. FUENTES^{a,b}, M. D. DURRUTHY-RODRÍGUEZ^b, O. RAYMOND^c, J. HEIRAS^c, M. P. CRUZ^c, J. M. SIQUEIROS^c

a) Facultad de Física, Universidad de La Habana, Cuba. hlinh@fisica.uh.cu†

b) Instituto Cibernética, Matemáticas y Física, Ciudad de La Habana, dolores@icimaf.cu

c) Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, AP 14, Ensenada, B.C, México, 22860

† autor para la correspondencia

Fueron obtenidas piezocerámicas libres de plomo con composición $[(K_{0.5}Na_{0.5})_{0.94}Li_{0.06}]_{0.97}La_{0.01}(Nb_{0.9}Ta_{0.1})O_3$ por el método cerámico tradicional; los polvos calcinados fueron sinterizados en su propia atmósfera. Los resultados muestran que el Li⁺, La³⁺ y Ta⁵⁺ difunden en la estructura del compuesto $(K_{0.5}Na_{0.5})NbO_3$ para formar una solución sólida con estructura perovskita. La caracterización por difracción de rayos-X demuestra que se obtuvo una mezcla de fases donde la fase mayoritaria presenta estructura ortorrómbica. Las propiedades dieléctricas como función de la temperatura presentan una transición de fase normal a 399°C. Las características piezoeléctricas calculadas mostraron valores de $k_p=0.34$, $Q_m=137$ y $f_{max}=1906$, lo que permite concluir que estamos cerca de obtener un sustituto potencial de las cerámicas PZT.

$[(K_{0.5}Na_{0.5})_{0.94}Li_{0.06}]_{0.97}La_{0.01}(Nb_{0.9}Ta_{0.1})O_3$ lead-free ceramics have been prepared by the traditional ceramic method. The calcined powders were encapsulated and sintered in their own atmosphere. Our results reveal that Li⁺, La³⁺ and Ta⁵⁺ diffuse into the $(K_{0.5}Na_{0.5})NbO_3$ lattice to form a solid solution with a perovskite structure. X-ray diffraction analysis showed a mixture of phases with a predominant orthorhombic structure. The dielectric properties plotted vs temperature show a normal phase transition at 399°C. The piezoelectric behavior is characterized by the values of $k_p=0.34$, $Q_m=137$ and $f_{max}=1906$, allowing us to conclude that a substitute for PZT ceramics is within reach.

PACS: Piezoelectricity, 77.65.-j; PZT ceramics, 77.84.Cg

INTRODUCCIÓN

Es conocido que una gran cantidad de dispositivos como: actuadores, sensores de ultrasonido, detectores de proximidad y filtros de ondas acústicas superficiales (SAW) están basados en la familia de cerámicas piezoeléctricas del compuesto $Pb(Zr_xTi_{1-x})O_3$ (PZT) [1-3]. Esto está dado por las magníficas propiedades que presenta este sistema en la vecindad de la zona morfotrópica ($x=0.53$) [1]. Sin embargo, no es deseable el procesamiento industrial de materiales que contengan plomo por las evidentes consecuencias de contaminación al medio ambiente. Es por ello que en los últimos diez años la comunidad científica ha trabajado arduamente en la búsqueda de un sustituto del sistema PZT, que no contenga plomo entre sus elementos [4-7]. En el 2004 científicos japoneses [7] obtuvieron un sistema equivalente al PZT basado en la combinación de la perovskita compleja $KNbO_3$ - $NaNbO_3$ (KNN), dopada con Ta, Li y Sb, utilizando un método original, más complicado, que produjo cerámicas texturadas de muy buena calidad [7]. Sin negar este gran logro, aún se continúa buscando sistemas análogos al KNN dopado por métodos más económicos y sencillos [4-10]. Estos métodos buscan resolver la

dificultad de la volatilización de los cationes K⁺ y Na⁺ en los procesos de obtención, que dificultan obtener cerámicas con altas densidades. D. Lin y col. [11] estudiaron el sistema KNN dopado con Li y Ta, encontrando alta densificación y buenas propiedades dieléctricas y piezoeléctricas. En el presente trabajo se expone el estudio de cerámicas KNN dopadas simultáneamente con Li, La y Ta, obtenidas por el método cerámico tradicional y caracterizadas morfológica, dieléctrica y piezoeléctricamente.

MÉTODO EXPERIMENTAL

La composición $[(K_{0.5}Na_{0.5})_{0.94}Li_{0.06}]_{0.97}La_{0.01}(Nb_{0.9}Ta_{0.1})O_3$ (KNNLiLaTa) fue preparada a partir de la síntesis en el estado sólido de los polvos: K_2CO_3 (99.0 %, FagaLab), Na_2CO_3 (99.0 %, FagaLab), La_2O_3 (99.99 %, metal Basic, Alfa Aesar), Nb_2O_5 (99.9 %, metal Basic, Alfa Aesar), Li_2CO_3 (99.0%, FagaLab) y Ta_2O_5 (99.0%, FagaLab). Previamente fue calculado el factor de tolerancia para la composición deseada de KNNLiLaTa suponiendo que el Li⁺ y La³⁺ ocupan el sitio A sustituyendo al Na⁺ y K⁺ y que el Ta⁵⁺

ocupa el sitio *B* sustituyendo al Nb^{5+} . El valor obtenido fue de 0.84 ($0.77 < t < 0.99$) [12], lo cual comprueba que la estructura es estable y es posible esta sustitución. Los polvos fueron mezclados por agitación magnética y se realizó una molida en un mortero de ágata en alcohol a 50°C, y luego mezclados nuevamente por agitación magnética a una velocidad de 400 rpm, durante 24 h. La calcinación a 700°C por 5 h fue realizada encapsulando el material en un crisol cerrado con los polvos embebidos en su propia atmósfera. Posteriormente los polvos calcinados fueron molidos nuevamente en las mismas condiciones de la primera molida. Las muestras se conformaron en discos de 11 mm de diámetro y 1 mm de espesor, a una presión de $2.5 \times 10^7 \text{ Pa}$. La sinterización se realizó a 1100°C a diferentes tiempos: 1 h, 1.5 h, 2.5 h, 5 h encapsulando el material en un crisol cerrado con los polvos embebidos en su propia atmósfera. Esto permitió seleccionar el tiempo óptimo de sinterización, que resultó ser de una hora, para el cual se obtuvo la mejor densidad experimental. La densidad de las muestras fue determinada por el método de Arquímedes.

La composición de las fases cristalinas en las cerámicas sinterizadas, fue determinada por medio de difracción de rayos-X (DRX) en un difractómetro *Philips X'pert* con radiación $\text{K}\alpha\text{Cu}$ ($\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$). Se analizó el intervalo de 10° a 70° en 2θ , con un paso de 0.033° , a 30 kV y 16 mA. El análisis cualitativo de fases y el indizado fueron realizados de acuerdo a los parámetros cristalográficos de la base de datos [13]. Los parámetros de la red del sistema KNNLiLaTa fueron calculados con ayuda de la ley de Bragg para las reflexiones presentes. A las muestras se les depositaron contactos de Ag por difusión térmica en ambas superficies del disco. La permitividad relativa (ϵ_r) y las pérdidas dieléctricas ($\tan\delta$) vs temperatura, fueron evaluadas con un puente *HP 3238 RLC* calentando con una tasa de calentamiento de $1^\circ\text{C}/\text{min}$ desde 30°C hasta 500°C . Las medidas se realizaron en el intervalo de 1 kHz a 100 kHz con un voltaje aplicado de 1 V de *ac*. La polarización se realizó bajo un campo de 1.6 kV/mm a una temperatura de 100°C durante 30 minutos. Con el fin de determinar el comportamiento electromecánico, a través del método resonante, se utilizó el *OMICRON Lab BODE 100*, de acuerdo con el Estándar *IEEE 176* para determinar la resonancia de las muestras, con un voltaje aplicado de 0.22 V. El factor de acoplamiento electromecánico del modo planar (k_p) y el factor de calidad (Q_m) fueron calculados utilizando un programa realizado en *Mathematica 8.0*, empleando las expresiones (1) y (2).

$$\frac{k_p^2}{1-k_p^2} = \frac{(1-\sigma^E)J_1\left[\varphi_1\left(1+\frac{\Delta f}{f_s}\right)\right] - \varphi_1\left(1+\frac{\Delta f}{f_s}\right)J_0\left[\varphi_1\left(1+\frac{\Delta f}{f_s}\right)\right]}{(1+\sigma^E)J_1\left[\varphi_1\left(1+\frac{\Delta f}{f_s}\right)\right]} \quad (1)$$

donde $\Delta f = f_p - f_s$, f_s es la frecuencia de resonancia, f_p es la frecuencia de anti-resonancia, σ^E es el coeficiente de Poisson, J_0 y J_1 las funciones de Bessel de primera clase y orden cero y uno respectivamente, φ_1 es la menor raíz positiva de la expresión $(1+\sigma^E)J_1(\varphi) = \varphi J_0(\varphi)$. $\sigma^E = 0.31$ y $\varphi_1 = 2.05$.

$$Q_m = \frac{1}{2\pi f_s C Z_{\min} [1 - (f_s/f_p)^2]} \quad (2)$$

siendo C es la capacidad media a 1 kHz y $Z_{\min}$ es el valor del mínimo de impedancia de acuerdo con las normas [14].

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En la Tabla I se muestran la densidad teórica y las densidades experimentales de las muestras del sistema KNNLiLaTa sinterizadas a 1100°C y a diferentes tiempos de sinterización. El mejor valor de densidad experimental fue obtenido para KNNLiLaTa01 (95% respecto a la densidad teórica) el cual es más alto que el valor reportado para el KNN [15], y se destaca que la introducción de los cationes Li^+ , La^{3+} y Ta^{5+} dentro del sistema favorece el aumento en la densificación de las muestras.

Muestra	Temperatura de Sinterización ($^\circ\text{C}$)	Tiempo de Sinterización (h)	Densidad (g/cm^3)
KNN ^a	-----	-----	4.46 (teórica)
KNNLiLaTa	-----	-----	4.82 (teórica)
KNNLiLaTa01	1100	1	4.60 (95%)
KNNLiLaTa02	1100	1.5	4.19 (87%)
KNNLiLaTa03	1100	2.5	4.17 (87%)
KNNLiLaTa04	1100	5	4.27 (89%)
^{a)} Referencia [15]			

A partir de estos resultados, se seleccionó la muestra KNNLiLaTa01 para la caracterización de las propiedades estructurales, dieléctricas y piezoeléctricas.

El patrón de difracción de rayos-X de la cerámica KNNLiLaTa01 muestra picos que responden a la distribución de intensidades y posiciones de una estructura isomorfa con la estructura perovskita (Figura 1) [11, 16]. De acuerdo a la literatura, el pico correspondiente a 2θ en 45.5° define si la estructura es tetragonal, cuando el primer pico es menos intenso, u ortorrómbica en caso contrario [17-19]. En la Figura 2 se observan parcialmente resueltas las reflexiones (202) y (020) lo que parece deberse a que existe una mezcla de fases y tensiones, con una fase mayoritaria ortorrómbica. Este resultado se vuelve a corroborar ajustando todo el espectro de rayos-X, mostrado en la Figura 1, con ayuda del programa *FullProf* [20]. Lo anterior se corresponde a la estructura obtenida para el sistema KNN-TaLa dopado con la misma cantidad de La [21].

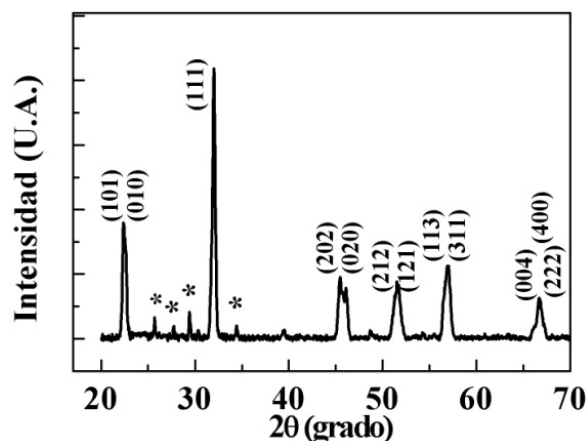


Figura 1: Patrón de difracción de rayos-X de la muestra KNnLiLaTaO1.

Los parámetros de la red calculados con ayuda del *FullProf* [20] para este compuesto fueron: $a = 5.605 \text{ \AA}$, $b = 3.934 \text{ \AA}$ y $c = 5.649 \text{ \AA}$.

Se marcaron con el símbolo “*” los picos pertenecientes a fases no deseadas asociados a $\text{K}_3\text{Li}_2\text{Nb}_5\text{O}_{15}$, $\text{K}_3\text{Li}_2\text{Ta}_5\text{O}_{15}$ según se reporta en la literatura [11].

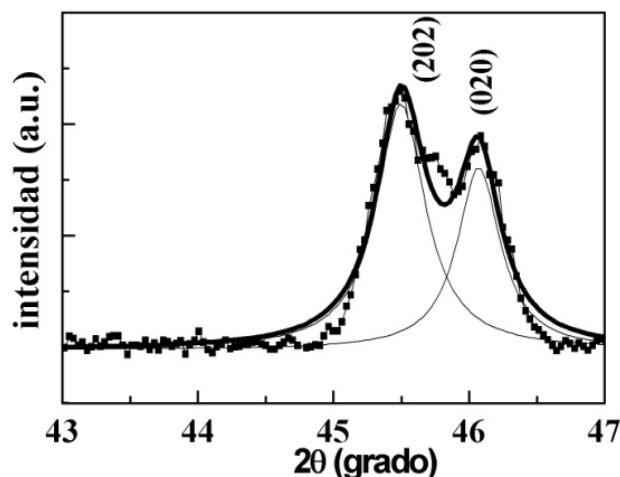


Figura 2: Detalle del patrón de difracción de rayos-X de KNnLiLaTaO1. Se aprecia que la estructura mayoritaria es ortorrómbica.

Hay un ensanchamiento en los picos, que puede ser debido a un tamaño pequeño de las cristalitas o tensiones. Esto puede ocurrir asimismo porque los dopantes no difunden completamente dentro del sistema $(\text{K}_{0.5}\text{Na}_{0.5})\text{NbO}_3$.

Las Figura 3 y Figura 4 muestran la dependencia de la permitividad relativa y las pérdidas dieléctricas con la temperatura en la muestra KNnLiLaTaO1 a diferentes frecuencias. Se observa bien definida la temperatura de la transición de fase tetragonal-cúbica a 399°C , siendo superior a la reportada para el KNnTaLa (353°C). Esta es una señal de la introducción del Li en la estructura, donde se observa el corrimiento de la temperatura de la transición, desplazándose hacia valores mayores; esto concuerda con lo reportado en otros trabajos [11]. También se observa un ensanchamiento de la transición ortorrómbica-tetragonal

a $T_{O-T} = 140^\circ\text{C}$, similar a la reportada en materiales KNN dopados con Ta y La [19], el cual muestra poca definición del pico de la transición y aparentemente una dependencia fuerte con la frecuencia. Ello se debe a que esta transición es polimórfica con mezclas de fases, a diferencia de la transición tetragonal-cúbica a 399°C .

De los resultados dieléctricos vs frecuencia no se observa dependencia con la frecuencia para la transición tetragonal-cúbica. También los resultados experimentales muestran que a temperaturas próximas a la ambiente, la dependencia de ϵ_r con la frecuencia se minimiza (Figura 3).

En la Figura 4 aparece el comportamiento de las pérdidas dieléctricas vs temperatura, observándose la presencia de tres picos a 1 kHz , los cuales están en concordancia con la presencia de pequeñas fases ligadas a las pérdidas de K y Na en la sinterización y a los procesos de conductividad eléctrica; esto se corresponde con la suavidad del pico correspondiente a la transición ortorrómbica-tetragonal, la caída suave de la transición tetragonal-cúbica y la influencia de la introducción del Li en la estructura.

En la literatura existen evidencias de que la sustitución de Li^+ disminuye la temperatura de sinterización, aumenta la temperatura de transición tetragonal-cúbica (T_c) y disminuye la temperatura de transición ortorrómbica-tetragonal (T_{O-T}). Al contrario del Li^+ , la sustitución de Ta^{5+} lleva a un aumento en la temperatura de sinterización y disminuye las temperaturas T_c y T_{O-T} [11].

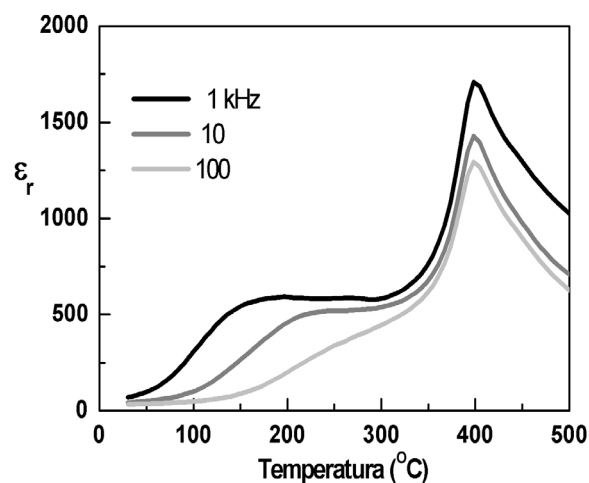


Figura 3: Permitividad relativa vs. Temperatura de la muestra KNnLiLaO1 a diferentes frecuencias.

Los resultados del sistema $[(\text{Na}_{0.5}\text{K}_{0.5})_{(1-x)/3}\text{La}_x]\text{Nb}_{0.95}\text{Ta}_{0.05}\text{O}_3$ [21] muestran que el catión La^{3+} se introduce en la estructura diseñada y provoca una disminución de las temperaturas de cada transición de fase. Estos resultados inducen a pensar que la introducción de Li, La y Ta en el sistema KNN provoca la suavización del pico de la transición T_{O-T} observada en la Figura 3, concordando con resultados reportados por G. C. Jiao y col. [19].

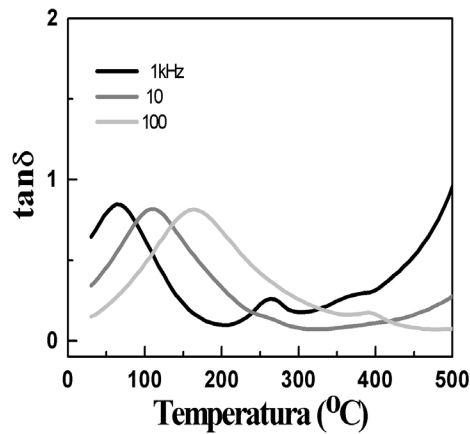


Figura 4: $\tan\delta$ vs. Temperatura de la muestra KNNLiLaTa01 a diferentes frecuencias.

La Tabla II muestra el valor de la temperatura de la transición de fase para la permitividad relativa y $\tan\delta$ para el sistema KNNLiLaTa01.

Tabla II				
Valores de las temperaturas de transición, de la permitividad máxima y pérdidas.				
Muestra	$T_{0-f}(^{\circ}\text{C})$	$T_{f-c}(^{\circ}\text{C})$	$\epsilon_{\max}$	$\tan\delta/1\text{kHz}$
KNNLiLaTa01	-----	399	1906	0.64

El coeficiente de difusividad de la transición tetragonal-cúbica se determinó mediante la ley Curie-Weiss modificada [22]

$$\frac{1}{\epsilon_r} - \frac{1}{\epsilon_m} = C^{-1}(T - T_c)^{\gamma} \quad (3)$$

donde ϵ_m es el valor máximo de la permitividad relativa en la temperatura de transición de fase T_c , γ es el coeficiente de difusividad con valor $1 < \gamma < 2$ y C es la constante de Curie-Weiss. Para un ferroeléctrico normal $\gamma = 1$, y para un ferroeléctrico relajador ideal $\gamma = 2$.

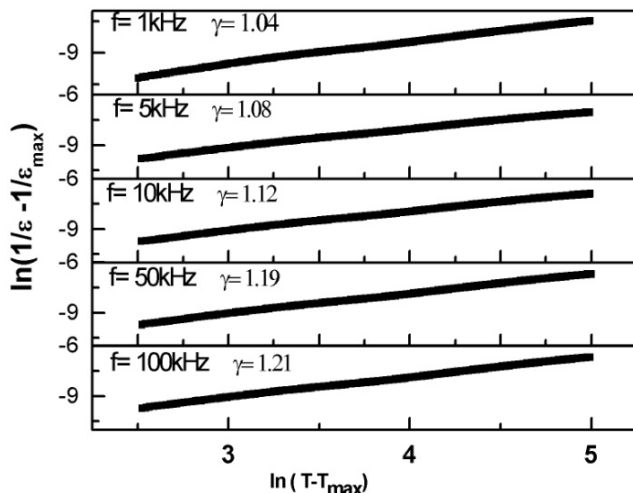


Figura 5: Dependencia de $\ln(1/\epsilon - 1/\epsilon_m)$ vs $\ln(T - T_m)$

En la Figura 5 se presenta la dependencia entre $\ln(1/\epsilon_r - 1/\epsilon_m)$ y $\ln(T - T_c)$ a diferentes valores de frecuencia. Del ajuste de mínimos cuadrados de los datos experimentales de la ley modificada [22], los valores obtenidos fueron $\gamma = 1.04, 1.08, 1.12, 1.19$ y 1.21 , para las frecuencias de $1\text{ kHz}, 5\text{ kHz}, 10\text{ kHz}, 50\text{ kHz}$ y 100 kHz respectivamente. Se puede ver que el valor γ está muy cerca a la unidad lo que significa que la transición se considera como una transición normal.

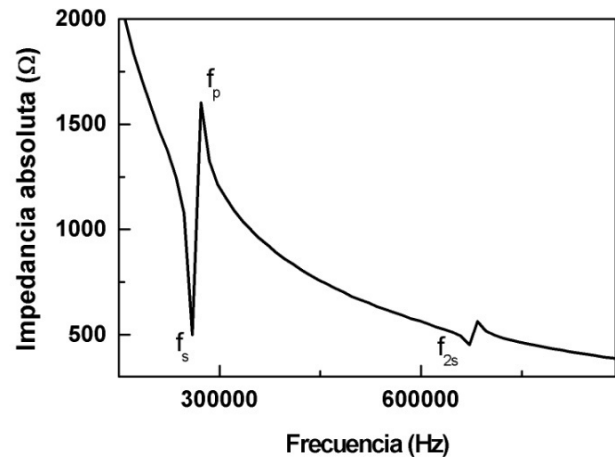


Figura 6: Espectro del módulo de la impedancia de la muestra KNNLiLaTa01 en función de la frecuencia.

La resonancia electromecánica es una medición necesaria para comprobar el carácter piezoeléctrico de los materiales. La Figura 6 muestra el espectro de impedancia para KNNLiLaTa01 del modo radial; de la curva experimental se determinaron las frecuencias de resonancia (f_s) y anti-resonancia (f_p), así como las impedancias mínima ($Z_{\min}$) y máxima ($Z_{\max}$) correspondientes. Además se midió la capacidad a 1 kHz , zona lejos de la resonancia. A partir de estos datos $f_s = 259.8\text{ kHz}$ y $f_p = 272.4\text{ kHz}$ se obtuvo el coeficiente electromecánico radial k_p y el factor de calidad electromecánico Q_m a temperatura ambiente, reportados en la Tabla III. Los valores obtenidos son aceptablemente buenos comparados con el KNN, considerando en este resultado la introducción de los cationes Li, La y Ta.

Tabla III						
Parámetros Electromecánicos						
k_p	Q_m	d_{33} (10^{-12}C/N)	d_{31}	g_{33} $10^{-13}(\text{Vm/N})$	g_{31}	s_{11} $10^{-12}\text{ m}^2/\text{N}$
0.34	137	9.13	17	4.0	2.41	12.64

CONCLUSIONES

Se presentaron los resultados de la caracterización del compuesto $[(\text{K}_{0.5}\text{Na}_{0.5})_{0.94}\text{Li}_{0.06}]_{0.97}\text{La}_{0.01}(\text{Nb}_{0.9}\text{Ta}_{0.1})\text{O}_3$, obtenido utilizando el método cerámico tradicional. Se alcanzó un 95% de la densidad teórica, la cual es más alta (4.82 g/cm^3) que las reportadas para el KNN. Del patrón de difracción de rayos-X, se deduce la existencia de una mezcla de fases donde la estructura ortorrómbica es la estructura de la fase mayoritaria. De la dependencia de la permitividad relativa y las pérdidas dieléctricas

con la temperatura se obtiene la temperatura de la transición T_{TC} a 399°C, siendo superior a la reportada para el KNNTaLa, indicándonos la introducción del Li en la estructura. Se observa un ensanchamiento de la transición T_{O-T} a 140°C, similar a la reportada por otros autores [20]. De los resultados dieléctricos vs frecuencia no se observa carácter relajador y difuso en este sistema. También los resultados experimentales muestran que a temperaturas próximas a la ambiente la dependencia de ϵ_r con la frecuencia se minimiza. Los valores de las pérdidas dieléctricas son altos. La transición de fase ferro-paraeléctrica es de tipo normal, confirmado por los valores obtenidos del coeficiente de difusividad γ . Los valores calculados permiten concluir que estamos cerca de un sustituto potencial de las cerámicas PZT para determinadas aplicaciones.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a E Aparicio por las medidas de DRX, y el apoyo recibido de los proyectos PAPIME PE 100409/Programa México, Centroamérica y el Caribe para el avance de la Ciencia, la Tecnología y la Innovación CONACYT-ICTP-SMF, al proyecto DGAPA-PAPIIT-UNAM No. 1N112610, y los proyectos CONACYT 127633 y 166286.

[1] B. Jaffe, W. Cook and H. Jaffe, *Piezoelectric Ceramics*, (Academic Press, London-New York, 1971).
 [2] Y. Xu, *Ferroelectric Materials and Their Applications*, (Elsevier Science Publisher B.V., The Netherlands, 1991).
 [3] M. E. Lines and A. M. Glass, *Principles and applications of ferroelectrics and related materials*, (Clarendon, Oxford, 1977)
 [4] Y. Zhen and J. F. Li, J. Am. Ceram. Soc **89**, 3669 (2006)
 [5] B. Malic, J. Bernard, J. Holc, D. Jenko and M. Kosec, J. of European Ceram. Society **25**, 2707 (2005)

[6] K. X. Chen, G. Xu, D. Yang and X. Wang, J. Appl. Phys. **101**, 044103 (2007)
 [7] Y. Saito, H. Takao, T. Tani, T. Nonoyama, K. Takatori, T. Homma, T. Nagaya and M. Nakamura, Nature (London) **432**, 84 (2004)
 [8] N. Klein, E. Hollenstein, D. Damjanovic, H. J. Trodahl, N. Setter and M. Kuball, J. Appl. Phys **102**, 014112 (2007).
 [9] S. J. Zhang, R. Xia and T. Shrout, Appl. Phys. Lett. **91**, 132913 (2007)
 [10] M. D. Maeder, D. Damjanovic and N. Setter, Journal of Electromechanics **13**, 385 (2004)
 [11] D. Lin, K. W. Kwok and H. L. W. Chan, J. Appl. Phys. **102**, 034102 (2007)
 [12] O. P. Martínez, “Estudio de sistemas ferroeléctricos de alta anisotropía electromecánica”. Tesis de Maestría, Universidad de la Habana, La Habana, 1994
 [13] Data bases *Powder Diffraction Files* (PDF) and *Inorganic Crystal Structure Database* (ICSD), tomadas del programa *FindIt* (2007)
 [14] H. Jaffe, E. A. Gerber, I. E. Fair, S. L. Ehrlich, W. D. George, R. L. Harvey, E. D. Kennedy and T. M. Lambert, Proc. IRE **49**, 1161 (1961)
 [15] R. E. Jaeger and L. Egerton, J. Am. Ceram. Soc. **45**, 209 (1962)
 [16] D. Lin, K. W. Kwok and H. L. W. Chan, Appl. Phys. **A91**, 167 (2008)
 [17] J. Hao, R. Chu, Z. Xu, G. Zang and G. Li, J. Alloys Compod. **479**, 376 (2009)
 [18] D. Lin, K. W. Kwok, K. H. Lam and H.L.W. Chan, J. Appl. Phys. **101**, 074111 (2007)
 [19] G. C. Jiao, H. Q. Fan, L. J. Liu and W. Wang, Mater. Lett. **61**, 4185 (2007)
 [20] J. Rodríguez-Carvajal, An introduction to the program Fullprof2000. (2011) (<http://www.ill.eu/sites/fullprof/>)
 [21] J. Hao, Z. Xu, R. Chu, W. Li, H. Li and Q. Yin, J. Alloys Compd. **484**, 233 (2009)
 [22] K. Uchino, S. Nomura, L. E. Cross, S. J. Tang and R. E. Newnham, J. Appl. Phys. **51**, 1142 (1980)

ROBERTO SOTO DEL REY, FUNDADOR DE LA UNIVERSIDAD DE ORIENTE Y DE SU DEPARTAMENTO DE FÍSICA

ROBERTO SOTO DEL REY, FOUNDER OF THE UNIVERSITY OF ORIENTE AND ITS DEPARTMENT OF PHYSICS

L. M. MÉNDEZ PÉREZ^a, E. J. ROCA ORIA^a, C. A. CABAL MIRABAL^b

a) Departamento de Física, Facultad de Ciencias Naturales, Universidad de Oriente. lmendezp@cnt.uo.edu.cu¹, eroca@cnt.uo.edu

b) Centro de Ingeniería Genética y Biotecnología. carlos.cabal@cigb.edu.cu

Se presenta una semblanza del Dr. Roberto J. Soto del Rey, fundador de la Universidad de Oriente y de su Departamento de Física, paradigma de hombre cívico con carácter vertical, de patriota abnegado, de educador clarividente y estoico profesor, fundador de escuelas.

We shortly account the life and work of Dr. Roberto Soto del Rey, founder of the University of Oriente and of its Physics Department, paradigm of a civic man of iron character, abnegate patriot, clairvoyant, stoical professor, and founder of schools.

PACS: History of Science 01.65.+g

INTRODUCCIÓN

La Universidad de Oriente es inaugurada el 10 de octubre de 1947. Su fundación se logra después de incontables gestiones e intensas luchas por diferentes instituciones sociales no gubernamentales, constituidas por profesionales e intelectuales con perspectiva de desarrollo, apoyadas por un movimiento de amplias capas de la sociedad santiaguera: la Sociedad de Estudios Superiores de Oriente, la Sociedad de Geografía e Historia de Oriente, el Grupo “Humbolt” y asociaciones profesionales de comerciantes e industriales. Del Consejo Universitario, órgano rector de la recién fundada universidad, era miembro el Dr. Roberto Joaquín Soto del Rey, quien, el día 4 de marzo de 1913, vino al mundo, en el seno de una familia pobre de emigrantes españoles, en el poblado de El Cristo.

En conmemoración del centenario del natalicio del Dr. Roberto Joaquín Soto del Rey, para rendirle merecido homenaje a este abnegado, clarividente y estoico profesor, en este artículo se presenta esquicio biográfico de este paradigma de hombre, fundador de escuelas.

SUS ESTUDIOS Y PRIMEROS AÑOS EN LA UNIVERSIDAD DE ORIENTE

Roberto Soto del Rey culmina sus estudios de bachillerato en 1934, en el Instituto de Segunda Enseñanza de Santiago de Cuba, y se gradúa en la Universidad de La Habana en 1939; de las treinta y siete asignaturas que cursó en esa Universidad, en veinte obtuvo calificación de sobresaliente, en una de ellas, Química Orgánica, premio y, del resto, en seis la calificación de notable. Todo este currículum le valía para el doctorado en

Ciencias Físico-Químicas y el título de Perito Azucarero. Le faltaron cuatro asignaturas para ser Ingeniero Químico Azucarero y cinco para el doctorado en Ciencias Físico-Matemáticas. Con anterioridad, en julio de 1934, ya había recibido el título de “Agrimensor y Tasador de Tierras”. En ese mismo año, 1939, fue nombrado Profesor de Física del Instituto de Segunda Enseñanza de Santiago de Cuba [1], donde desempeñó, desde sus inicios, una meritoria labor. Al abrir sus puertas la Universidad, lo hizo con la Facultad de Ingeniería Química Industrial, en la que, entre las disciplinas a cursar en su currículum del primer curso de la carrera del mismo nombre, estaba la Física Superior. El Dr. R. Soto Rey, por acuerdo del Consejo Universitario, trece días después de inaugurada, se hace cargo de la Cátedra de Física, en sustitución del Dr. Ángel Álvarez Ponte, quien, por residir en La Habana, no tomó posesión de su cargo [2]. De esta manera, el Dr. Roberto Soto del Rey es fundador de la Universidad de Oriente y de su actual Departamento de Física



Figura 1. Roberto Joaquín Soto del Rey (foto tomada en enero de 1992).

La verticalidad y el espíritu de no violar los principios en que se sustenta la obra iniciada llevan al Dr. Soto del Rey, en fecha tan temprana para la Universidad de Oriente como el primero de febrero de 1948, en la sesión correspondiente del Consejo Directivo, a solicitar su renuncia como miembro del mismo y como miembro del Claustro Universitario, en protesta a la moción, secundada por el rector, por otros miembros del Consejo y algunos profesores, de pasar la Universidad a un patronato, privándola de su carácter público. Su renuncia se aprueba en la sesión del 9 de abril [3], pero el movimiento iniciado contra este proyecto fue tan fuerte que, finalmente, la moción fue desestimada: la Universidad mantuvo su carácter público y Soto del Rey se reincorpora a la comunidad universitaria.

En agosto de 1947, como miembro del Consejo Directivo fundador de la Universidad de Oriente, participó en la comisión encargada de redactar los Estatutos de la Universidad; en octubre fue designado profesor de Física de la Facultad de Ingeniería y el 11 de diciembre del propio año para que redactara el prospecto contenido de los fines y propósitos de la Facultad de Ingeniería Química, confiriéndosele todas las facultades para que incluyese todos los datos y antecedentes que considerase oportuno.

En noviembre de 1948 se le nombró, con carácter honorario, Profesor de Investigación de la Escuela de Ingeniería Química Industrial y rindió informe de la labor de investigación de la Universidad al Consejo Universitario el 20 de abril de 1949. En 1951 fue designado Secretario de la Facultad de Ciencias e Ingeniería y miembro de la comisión para redactar el proyecto de organización de la Escuela de Ciencias y las carreras de Ciencias Naturales y de Físico-Química de la Facultad de Ciencias e Ingeniería, que incluía a los planes de estudios de éstas.

En 1952 fue designado para una comisión de lo que hoy llamaríamos de Extensión Universitaria o de Orientación Vocacional, para que diese propaganda a la Universidad de Oriente en los Términos Municipales de Manzanillo, Campechuela y Niquero, de la Provincia de Oriente.

Con fecha 26 de febrero de 1952, el Secretario General de la Universidad, Dr. Ernesto Pujals Fernández, le envía una carta al Dr. Roberto Soto del Rey, la cual transcribimos textualmente:

Señor

Cúmpleme informarle a Ud., que el Consejo Universitario, en sesión celebrada el día 30 de Enero pasado, acordó enviar anualmente dos profesores al extranjero a realizar estudios de ampliación en Facultades de Graduados. Igualmente le comunico que Ud. ha sido designado para ser el primero que disfrute de los beneficios del anterior acuerdo.

De usted atentamente

Dr. Ernesto Pujals Fernández, Secretario General de la Universidad.

Este hecho es una muestra fehaciente del reconocimiento al quehacer universitario en los primeros años de la Universidad del Dr.

Roberto Soto del Rey, que ya había publicado doce obras o textos para los cursos que impartía en ese centro.

PERSONALIDAD

Soto del Rey fue un fiel seguidor de las concepciones de José Agustín Caballero y Rodríguez, quien abogaba "... por la enseñanza en Cuba de la Física copernicana y la del inglés Newton; deseaba la Física Experimental y Aplicada para que los jóvenes, apoyados en ella, ayudasen al fomento nacional..." [4].



Figura 2. R. Soto del Rey (señalando en la pizarra) en el primer laboratorio de Física de la Universidad de Oriente. Foto tomada dentro del período 1962-1964.

También el Dr. Soto del Rey fue un devoto del racionalismo cartesiano y del experimentalismo de Galileo Galilei, desempeñando una loable labor al crear nuevas prácticas de laboratorio.

Soto no restringió su quehacer al plano académico. Desde la época del Machadato, de forma activa, se rebeló contra la injusticia y, desde entonces, enarboló las banderas del progreso social, ya en su condición de estudiante, o como profesor de la Enseñanza Media y Universitaria, participando en la organización de huelgas contra los dictadores de turno, luchando por un nuevo edificio para el Instituto de Segunda Enseñanza de Santiago de Cuba (el actual "Cuqui Boch"), negándose a una Universidad retrógrada, abogando por una universidad científica y popular.

Triunfa la Revolución Cubana y Soto del Rey participa activamente en la Reforma Universitaria, siendo miembro de la Asamblea Estatuaria y designado como representante de nuestro centro en el Consejo Superior de Universidades. En aquellos años iniciales, la asamblea de estudiantes de Física de la Universidad de La Habana pidió (cuando aún en la nuestra no se formaban físicos) que Soto fuera su director: tal era su autoridad académica en todo el país. Soto no sólo fundó escuelas, sino también las Milicias Nacionales Revolucionarias. Participó en diversas movilizaciones, incluso durante la Crisis de Octubre. Fue, además, un machetero esforzado a lo largo de varias zafas del pueblo.

Soto del Rey, desde la década de los años cincuenta, fue precursor, en la Universidad de Oriente, de acciones para establecer contac-

tos internacionales con instituciones científicas y académicas en el mundo, yendo directamente a nutrirse de los avances de las escuelas francesa e italiana. Así, en 1955, estuvo en la Sorbona de París y en Milán, entre otros lugares, y adquirió conocimientos sobre Teoría de la Relatividad, Teoría Cuántica, Física Estadística y Cálculo Tensorial. Ya en los años sesenta, mantuvo contacto con italianos, y solicita colaboración a autoridades soviéticas en los primerísimos meses de la revolución. Recabando apoyo para el desarrollo de la ciencia, visita la URSS, Polonia, Bulgaria, etc.

Esta es una etapa de definiciones y de establecimiento de una corriente pedagógica propia en cuanto a la enseñanza de la Física para estudiantes de pregrado de Ingeniería y de Ciencias, en ambos casos con un perfil de aplicación. Gesta, así, la idea de ofrecer una carrera de Física Industrial, tema que hoy día se le da gran importancia internacionalmente. El Dr. Soto del Rey fue un abanderado y precursor de estas ideas y del fomento de las investigaciones científicas, muy pobres en aquella época. Lamentablemente, sólo fueron ideas muy loables.

Como comprendía el fundamental papel de la Historia de la Ciencia en su enseñanza, y para preservar y transmitir el legado de aquéllos que contribuyeron al desarrollo de la Física, en el antiguo local del Departamento de Física, a lo largo del pasillo que conducía a los laboratorios, instaló una modesta, pero significativa, galería de imágenes comentadas de físicos y hombres de ciencia relacionados con la Física, orgullo indiscutible del Departamento y admirada por todo aquél que tenía la oportunidad de deleitarse con ella, a la vez que adquiría conocimientos.

Todos estos hechos son, evidentemente, sólo una muestra que ejemplifica una vida dedicada por entero, estoicamente, a la enseñanza (desde que le conocimos, nunca disfrutó de vacaciones y nunca se enfermó), labor que se nutrió de su incansable afán de saber, de beber el conocimiento de muchas fuentes. Esto le hizo poseedor de una sólida cultura (entendida, no como la mera acumulación de conocimientos diversos, sino como la articulación racional y estética de los mismos, de modo que puedan interactuar más dialécticamente con otros, para conseguir una visión integral de su universo intelectual) que empleó, unida a un fuerte carácter, a un sentido del humor muy penetrante – en ocasiones, hiriente – y a un valor personal excepcional, a fustigar a todas las lacras sociales que se ponían a su alcance. “Para mí, la cultura es un látigo”, le confesó, en una ocasión, a uno de los autores de estas líneas.

Sólo esta mezcla de dedicación y talento en lo académico, con una vertical postura moral de hombre comprometido con su tiempo y con su patria, pueden explicar el prestigio y el cariño que consiguió entre sus estudiantes, amigos y compañeros de trabajo. Sólo así puede entenderse el respeto que imponía su personalidad, dentro y fuera del aula, a pesar de sus condiciones físicas, aparentemente adversas: era una persona baja de estatura, muy delgada, estrecha de hombros, de cara y nariz muy alargadas, muy miope, de voz muy ronca y, muchas veces, casi inaudible.... Pero, con la cólera, la mirada se hacía penetrante y, cuando enseñaba, su voz llegaba a todo un auditorio de más de cien personas,

a veces, en locales con malas condiciones acústicas, ayudado por el silencio sepulcral con el que los estudiantes recibían sus enseñanzas. Al calificar exámenes docentes y personas, era estricto, implacable y, en ocasiones, despiadado... pero sus estudiantes le idolatraban y tenía un sentido muy profundo y desinteresado de la amistad. No debe sorprender, entonces, que se convirtiera en una leyenda viva (que sepamos los autores, desde la década del sesenta): estudiantes y amigos le hicieron protagonista de muchas anécdotas cargadas de humor, relacionadas con su labor profesoral o con su vida personal, algunas inciertas y otras exageradas, pero que contribuyeron a que su fama se extendiera a todo el país y con las cuales podría escribirse un libro.

Soto del Rey fue también un precursor de los estudios de Biofísica en nuestra Universidad de Oriente y su siembra, con el decursar del tiempo, se ha materializado en dos de sus dependencias: el Centro de Biofísica Médica y en algunas investigaciones que se realizan en el Centro Nacional de Electromagnetismo Aplicado.

OBRA PUBLICADA

Una entidad académica alcanza madurez cuando, además de preservar la cultura, es capaz de generarla. Ya el Departamento de Física de la Universidad de Oriente, en los primeros años de la década del sesenta, alcanza ese estadio y, así, en septiembre de 1961, ve la luz la obra “Tensión superficial y soluciones líquidas” de los Doctores Roberto Soto del Rey y Luis Aguilar Salcedo (también loable profesor de Física de la Universidad de Oriente y estrecho colaborador de Soto del Rey), en cuyo prólogo se expresa: “... con este trabajo, el Departamento de Física inicia la publicación del curso de Física que se imparte a los que estudian Ingeniería en la Universidad de Oriente...No nos gustaría que la obra cuyo primer tomito es éste, pudiera sustituir a otras, sin duda mejores, como uno de los ingredientes que van a integrar la superestructura intelectual del estudiante, porque siempre hemos estimado y proclamado como dañino el libro de texto único en los estudios superiores, y por tanto, siempre hemos recomendado en nuestras clases bibliografía para los estudios de física...” [5].

Es ésta una aspiración de la década anterior hecha realidad; en los años siguientes se publican otros tomos de los mismos autores: “Estática”, “Cinemática”, “Hidrodinámica” y, en 1966, “Vibraciones y Acústica”.

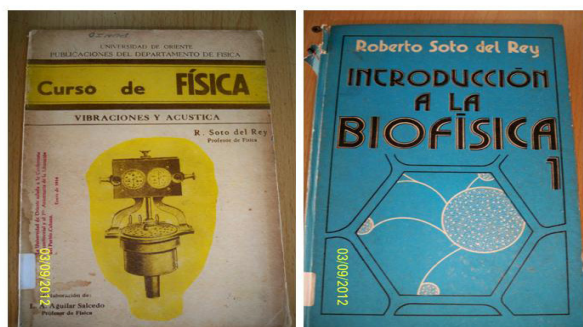


Figura 3. Ejemplares de los textos más importantes escritos por el Dr. Soto del Rey. A la izquierda, uno de los tomos de su texto del curso de Física. A la derecha, uno de los tomos de “Introducción a la Biofísica”.

Estas obras reflejan la personalidad del Dr. Soto del Rey, no sólo por haberlas publicado, sino más bien por el estilo que las caracterizan: a partir de cortos epígrafes, aislados al parecer unos de otros, se conforman los de mayor jerarquía, hasta llegar a los capítulos; se va construyendo, poco a poco, el conocimiento y la teoría más general. En ellos, se emplea la cantidad necesaria de palabras: si falta una, la idea queda inconclusa; una más sería superflua. Este método expositivo es característico del Dr. Roberto Soto del Rey: la conjugación del racionalismo y la síntesis, su gran dominio del idioma, su cultura y su vasta experiencia pedagógica le permitieron dar sus clases con este mismo estilo, con las palabras estrictamente necesarias para las explicaciones orales, lo cual era plasmado, sintetizadamente, en la pizarra, de una manera tan organizada y estética, que hoy nos parecería fruto de algún editor computacional. La experiencia y la razón están también presentes en sus obras; para llegar al conocimiento, se describen múltiples experiencias y, por generalización, se llega a conclusiones teóricas. Nunca olvidó el rigor teórico y experimental ni las aplicaciones prácticas.

Siguiendo la misma concepción de aquel primer tomo del Curso de Física publicado en 1961, el Dr. Roberto Soto del Rey continuó su labor de escribir y presentar a sus alumnos las conferencias que dictaba en formato de libro: con su estilo propio, publica dos tomos de Ejercicios de Mecánica Clásica y su obra cumbre: los cuatro tomos del curso “Introducción a la Biofísica”, en la Editorial “Oriente”, en 1988. Esta obra es fruto del trabajo universitario y extrauniversitario: universitario, porque es el producto de largos años de su labor académica impartiendo la Física para médicos (incluidos muchos profesores de la Facultad de Ciencias Médicas), estudiantes de medicina y biología; extrauniversitario, porque nadie le encomendó al Dr. Roberto Soto del Rey tal misión, sólo su sentido del deber, la necesidad de la misma y su profunda intuición para detectar tal necesidad. El texto, con un lenguaje riguroso característico, nos adentra en el campo de la Biofísica.

La obra “Introducción a la Biofísica” es un magnífico texto para un amplio círculo de lectores. En ella se exponen los rudimentos de Física que deben conocer los biólogos, farmacéuticos, médicos, bioquímicos, veterinarios. Pero, en ella, se encierran también grandes enseñanzas para aquéllos que estamos vinculados a la Física “pura”. Esta obra posee un inapreciable valor para los fisi-

cos que tienen a su cargo la formación de pre y posgrado de las especialidades de Biología, Farmacia y Medicina. El elemento más característico y complejo de la obra es la motivación. No hay tópico de la Mecánica, la Física Molecular, la Óptica o el Electromagnetismo que no sean debidamente ilustrados, en los cuatro tomos, con ejemplos biológicos.

Es de destacar que el Dr. Soto del Rey, cuando comenzó a dar clases en las carreras de Medicina y Biología, se dio cuenta de que explicar con éxito la Física a los estudiantes de estas carreras era imposible con el empleo de los textos tradicionales, dedicados a estudiantes de perfiles técnico o físico: era necesario concebir cursos *sui generis* para las carreras de corte biológico. Contaba ya con más de cincuenta años, una edad en la que muchos profesores se adocenaban y, en el mejor de los casos, se limitan a continuar desarrollando las líneas de trabajo que ya han empezado. A esa edad, el Dr. Soto del Rey comenzó, prácticamente “desde cero”, a documentarse en los aspectos biológicos que necesitaba para concebir sus nuevos cursos, de modo que resultaran útiles para biólogos y médicos. Esto significó pasarse horas y horas todos los días, durante meses, en la biblioteca de la Facultad de Medicina, hasta que logró hablar en el lenguaje de los médicos, desentrañar sus problemas y pudo plasmar en el papel su obra ya mencionada, “Introducción a la Biofísica”, que hoy es libro de texto de los estudios de posgrado de la carrera de Medicina.

[1] H. Soto “Biografía: Roberto Joaquín Soto del Rey”, *Energía y tú*, Vol. 9 (enero – marzo 2000), p. 33.

[2] Acta No. 13 del Consejo Directivo de la UO, 23 de Octubre de 1947.

[3] Acta No. 23 del Consejo Directivo de la UO, 9 de Abril de 1948.

[4] F. González del Valle, R. Agramonte, “José Agustín Caballero Philosophia Electiva”. Biblioteca de Autores Cubanos, Univ. de la Habana, pág. XLIII.

[5] R. Soto del Rey, L. Aguilar Salcedo “Tensión superficial y soluciones líquidas”, Editora Universitaria, UO, 1961, pág. I.

FÍSICA Y MÚSICA: DEL TIMBRE, A LO DESCONOCIDO

D. STOLIK

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

En forma sucinta se describe la relación entre la física –con su lenguaje matemático– y la música. Se analizan algunos conceptos fundamentales: frecuencia y altura, el intervalo musical, la escala, la frecuencia fundamental de un tono, la no linealidad e inarmonicidad de los instrumentos musicales, y el comportamiento en el dominio frecuencia-tiempo característico de la música. Finalmente, se presentan campos de investigación abiertos en el ámbito de la física y la música.

The relation between physics –with its mathematical language– and music is briefly described. Concepts such as frequency, height, musical interval, scale, fundamental frequency, tone, non-linearity and “anharmonicity” of musical instruments are presented, as well as the behavior of music in the frequency-time domain. Finally, open research fields in the scenario of physics and music are presented.

INTRODUCCIÓN

Arte es virtud, disposición y habilidad de hacer cosas, sobre la base de un conjunto de preceptos y reglas, representa el acto o facultad mediante los cuales, el hombre, valiéndose de la materia, de la imagen o del sonido, imita o expresa lo material o lo inmaterial, crea copiado o fantaseando, y así transmite sentimientos de placer, satisfacción, diversión, tristeza y hasta depresión [1].

La ciencia, aunque también provoca distintas sensaciones en el hombre, fundamentalmente representa el conocimiento cierto de las cosas por sus principios y causas, metódicamente formado y ordenado en un cuerpo que constituye una rama particular del saber humano [2].

La física es una ciencia donde los fenómenos se demuestran, se miden cuantitativamente y se comprueban experimentalmente. Existe el consenso de que surgió como ciencia en el siglo XVI [3]. En quinientos años ha sido fundamental para la comprensión del universo y ha alcanzado un avance tal que ha originado un espectacular desarrollo científico y tecnológico.

La música, sin embargo, es mucho más antigua: todo parece indicar que los primeros instrumentos musicales aparecieron hace algunas decenas de miles de años. Aunque aún es objeto de debate [4], se ha documentado la “flauta” del “Hombre de Neandenthal”: un instrumento de 4 huecos, construido con un hueso de oso hace unos 40 mil años.

La música es un arte cualitativo muy ligado a los sentimientos humanos, que está presente en la vida cotidiana de cada uno de nosotros. Por lo tanto, al referirnos a la física y a la música estamos hablando de dos escena-

rios que son trascendentales en la vida del hombre, pero cuya interrelación es relativamente poco conocida por muchos.

Un elemento que con el paso del tiempo ha vinculado cada vez más el arte y la ciencia es la tecnología: ésta constituye el lenguaje propio de una ciencia, arte, o de ambas a la vez, que se plasma en un conjunto de productos, instrumentos, equipamientos y procedimientos cada vez más con carácter industrial. Es la física la madre de muchas de las tecnologías que se han ido incorporando y utilizan ampliamente en la música, hasta las más recientes como son, por ejemplo las importantes tecnologías digitales MIDI [5] surgida en 1983 y la de sintetizadores y *samplers* [6].

Este artículo va dirigido a un lector que domina los fundamentos de la matemática y la física, y que está familiarizado con la computación. A continuación, explicamos algunos conceptos del ámbito musical en términos familiares para nuestros lectores.

En realidad es imposible en un artículo sucinto, como éste, reflejar toda la problemática físico-matemática del tema. Nuestro propósito es partir del papel de las funciones matemáticas elementales, pasando por los elementos no armónicos y no lineales, hasta llegar a los problemas del dominio frecuencia-tiempo en que se mueve la música, en forma análoga al principio de incertidumbre que se postula en la mecánica cuántica, pero para el dominio tiempo-frecuencia, donde las transformada clásica de Fourier no opera. Esperamos que esta descripción motive a nuestros colegas físicos a que se acerquen a una temática generalmente poco conocida.

Antes de continuar, vale la pena mencionar que existe literatura donde se puede hacer una lectura complementaria sobre la física y la música [7-10], así como el libro de este autor en soporte electrónico de la multimedia “Física y Música” [11].

Finalicemos esta sección haciendo notar que es también muy poco conocido el aporte que por unos 400 años, desde Stevin y Galileo, hasta Moog (fallecido recientemente) han realizado físicos muy notables al desarrollo de la música [12-15].

LA INTENSIDAD DEL SONIDO

Comencemos por introducir brevemente la recepción del sonido por el oído humano. La potencia y la intensidad de la onda sonora, válidos, por supuesto, para el sonido musical, son proporcionales al cuadrado de la amplitud [16]:

$$I = cX_m^2 \quad (1)$$

Donde I es la intensidad de la onda sonora, X_m es la amplitud, y c , una constante.

Sea I_0 la intensidad mínima del sonido (estímulo) que el oído humano, como promedio, es capaz de percibir, que se define como valor típico del umbral de audición humana. Se ha determinado que su valor es:

$$I_0 = 10^{-12} \text{ W/m}^2 \quad (2)$$

Esta potencia se corresponde, increíblemente, con un desplazamiento de la vibración del tímpano del orden del radio atómico del átomo de hidrógeno [17]. Además, se ha comprobado que el rango de intensidades que el oído es capaz de detectar es de un millón de millones de veces mayor que I_0 [18]. O sea, que la relación I/I_0 del oído humano barre un rango de... ¡12 órdenes de magnitud!

Por ser la escala de audición sobre la base de I/I_0 demasiado extensa (y, por lo tanto, incómoda) se utiliza el logaritmo de I/I_0 como escala de audición. Así, el nivel de sonido (SL), expresado en *decibeles*, se define como:

$$SL = 10 \log(I/I_0) \quad (3)$$

LA ALTURA

En música, la altura no es equivalente a la intensidad del sonido [7,8]. La altura es la sensación, también llamada tono, que percibe una persona en un rango de sonidos desde graves hasta agudos, a partir del estímulo que recibe de una onda sonora de cierta frecuencia. La relación existente entre dicho estímulo y la sensación producida es sumamente compleja.



Figura 1. El “Theremin”: La física al servicio de la música. Este instrumento, concebido por el físico y músico soviético Lev Segueevich Termen en 1919, logra sonidos musicales derivados del efecto capacitivo del cuerpo humano sobre ondas electromagnéticas. En la foto, un ejemplar del instrumento que se expone en el Museo Nacional Noruego de Ciencia y Tecnología (foto: E. Artshuler).

EL INTERVALO MUSICAL Y LAS DIVISIONES

El intervalo musical es la diferencia existente entre dos sonidos (tonos) de distinta altura. Es uno de los elementos de la música más importantes, su primera cuantificación matemática data de los pitagóricos hace unos 2500 años, en términos de relaciones de números enteros de longitudes de las cuerdas [7,8,11]. Concretamente, si una cuerda se fijaba en 1/2, en 2/3 o en 3/4 de su longitud, la altura de los sonidos percibidos al vibrar eran característicamente distintos (lo que se produce, por ejemplo, al “presionar” las cuerdas de una guitarra en diversas posiciones a lo largo de su brazo). Estamos hablando aquí de relaciones de longitud; por ejemplo:

$$L_2 / L_1 \quad (4)$$

donde L_2 es la longitud de una cuerda que origina una sensación específica de altura en el sistema oído-cerebro, L_1 define otra altura, y L_2 / L_1 es el intervalo resultante entre esas dos longitudes de la cuerda tensada. Obsérvese el curioso hecho de que el intervalo no está definido como la diferencia entre dos longitudes, sino por su cociente.

Unos 2000 años después se definía el concepto de *frecuencia* en las cuerdas tensadas y la caracterización del intervalo musical posteriormente se realizaba por relaciones de frecuencias entre dos sonidos de distintas alturas, o sea, más grave o más aguda:

$$f_2 / f_1 \quad (5)$$

Mucho más tarde, se descubrió que las frecuencias de una cuerda tensada vibrante estaban dadas por la expresión [11]:

$$f = \frac{n}{2L} \sqrt{\frac{T}{\mu}} \quad (6)$$

Donde n es el modo de vibración, T es la tensión de la cuerda, L es su longitud, y μ es la masa por unidad de longitud de la cuerda. Supondremos que todas las magnitudes están dadas en el Sistema Internacional de Unidades (SI). Es evidente de (6) que en una misma cuerda (monocordio), por ser T y μ constantes, se obtiene:

$$\frac{f_1}{f_2} = \frac{L_2}{L_1} \quad (7)$$

Relación ampliamente utilizada para los instrumentos de cuerda desde la antigüedad.

EL TIMBRE

¿Por qué pueden distinguirse dos instrumentos musicales distintos que emiten una nota de la misma frecuencia? Eso se explica debido a que cualquier sonido musical tiene una frecuencia, llamada fundamental [7,8,11], que es la mas pequeña de un conjunto de frecuencias de ondas viajeras sinusoidales (armónicos) múltiplos enteros de la fundamental, con distintas amplitudes y que todas en conjunto dan la característica de sonido distinto entre (por ejemplo) un piano, un oboe o un violín. Todas esas amplitudes distintas de frecuencias específicas se superponen y modifican la forma de la señal producto de la síntesis de Fourier.

El fenómeno consiste [11] en que la sinusoide de la frecuencia fundamental va modificando su forma cuando se van superponiendo los armónicos superiores, pero el periodo de la señal compleja que se forma sigue siendo igual al periodo de la primera sinusoide de la frecuencia fundamental. La *forma* resultante es la que caracteriza el *timbre* del sonido en cuestión, cuya forma compleja se repite con la misma periodicidad de la frecuencia fundamental, que en definitiva caracteriza la frecuencia de toda la señal compleja (ver figura 2).

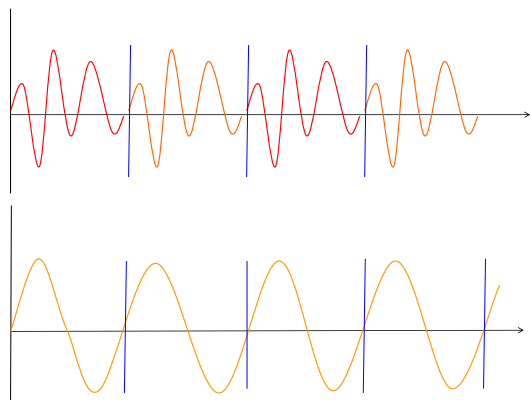


Figura 2. Gráficos de amplitud contra tiempo de una onda sonora asociada a un supuesto instrumento musical. Panel superior: onda original, cuya forma “compleja” caracteriza el timbre del instrumento (contiene todos los armónicos de Fourier). Panel inferior: Armónico fundamental de la onda de arriba. Nótese, arriba, que entre las líneas finas verticales, se repite el mismo período de la componente fundamental.

Los *armónicos* del timbre responden a la función lineal:

$$f = nf_0 \quad (8)$$

donde f_0 es la frecuencia fundamental (la menor involucrada en el timbre), n es un número entero, y f es la frecuencia de los armónicos superiores –una función extremadamente importante en la música.

LAS ESCALAS MUSICALES

La escala musical es un conjunto con cierta ordenación de distintas alturas con intervalos que se expresan matemáticamente, donde por cientos de años primó el concepto de intervalos (pitagóricos) descritos por relaciones de números enteros [11]. El intervalo musical que más fácilmente se reconoce por el hombre sin necesidad de instrumento alguno es el de la denominada *octava*. La frecuencia de una octava inmediata superior tiene el doble de la frecuencia de la nota de anterior. Así, la frecuencia de la octava n -sima se expresa así:

$$f_n = 2^n f_0 \quad (9)$$

donde, nuevamente, n es un entero [11]. Nótese la gran diferencia entre la definición de los armónicos del timbre (8) y la de las octavas (9). En el caso de la escala musical compuesta por 12 intervalos iguales, las frecuencias se expresan como:

$$f_m = 2^{\frac{m}{12}} f_0 \quad (10)$$

Esta es la escala que ha partir del siglo XIX, se generalizó en el Occidente, después de grandes controversias sobre qué escalas son más “puras”. Éste es un aspecto de grandes contradicciones teóricas aún actuales, muy relacionado con la incomprensión de la belleza y de la gran utilidad de los números irracionales como π , e , etc. en la descripción matemática de los fenómenos físicos [11].

LINEALIDAD E INARMONICIDAD EN LA MÚSICA

El estudio más elemental de los instrumentos musicales se basa en un tratamiento de aproximación lineal de los armónicos. El término lineal implica que un incremento en la entrada de cualquier sistema produce un incremento directamente proporcional en la salida y los efectos provocados por las distintas excitaciones en las entradas son simplemente aditivos a la salida.

Como se ha dicho, se estima que el sonido musical puede ser descrito en términos de componentes (armónicos), cuyas frecuencias son números enteros de una frecuencia fundamental. La aproximación armónica se debe a que los modos de frecuencia (vibraciones) de las cuerdas tensadas y las columnas de aire cilíndricas y conos de los instrumentos de viento son armónicos. Ellos son resonadores pasivos que se acoplan a una

fuerza de energía de excitación controlable (arcos de fricción, chorros de aire de lengüetas vibrantes, etc.) para provocar y mantener o no las oscilaciones.

En los instrumentos musicales de percusión (campanas, *gongs*, *drums*, tumbadoras, bongoes) los modos no se relacionan armónicamente, sino que son altamente inarmónicos, de lo que se derivan sus sonidos característicos.

Si profundizamos en la física de estos fenómenos, encontramos que los modos de una cuerda tensada real (frotada, como en el violín, o percutida, como en el piano) no son exactamente armónicos debido fundamentalmente a la inflexibilidad de las cuerdas. En los instrumentos de viento, se observa que las vibraciones de los modos de las columnas de aire de tubos cilíndricos son apreciablemente inarmónicos debido a la variación de la longitud de onda (y por lo tanto la frecuencia) al final del tubo cilíndrico.

En la aproximación armónica se asume que un segundo generador suministra una resistencia negativa de magnitud limitada, suficiente para compensar las pérdidas acústicas y mecánicas de un primer resonador. En los instrumentos de viento el primer resonador es la columna de aire, que al mismo tiempo radía el sonido al aire de la atmósfera. En realidad, el segundo generador es comúnmente altamente no lineal y el acoplamiento que forma con el primer resonador es tan fuerte que no pueden considerarse por separado. El acoplamiento de retroalimentación entre ambos es sumamente importante en el comportamiento del instrumento. Los modos del primer resonador son apreciablemente inarmónicos, como los instrumentos de madera y viento que poseen un resonador de tubo con huecos, con resonancias marcadamente inarmónicas

Para entender los efectos de no linealidad de los instrumentos musicales es necesario examinar el acoplamiento entre el generador y el resonador (de resistencia negativa) que mantiene las oscilaciones [19].

Las oscilaciones libres o propias del resonador están constituidas por la superposición de todos los modos normales $y_n(t)$, que cuando no tienen pérdidas (caso irreal), obedecen a la ecuación:

$$\frac{d^2 y_n}{dt^2} + \omega_n^2 y_n = 0 \quad (11)$$

cuya solución responde a expresiones perfectamente armónicas. Pero como siempre hay pérdidas (disipación de energía), la ecuación toma la forma:

$$\frac{d^2 y_n}{dt^2} + \alpha_n \frac{dy_n}{dt} + \omega_n^2 y_n = 0 \quad (12)$$

donde ω_n son las frecuencias angulares de los “modos propios” y α_n son los coeficientes de amortiguamiento, producto de las pérdidas.

Desde luego, siempre debe haber un generador que provoca las excitaciones forzadas de las vibraciones normales del resonador (por ejemplo, frotar la cuerda en un violín o martillarla en el caso del piano) y la ecuación se convierte en:

$$\frac{d^2 y_n}{dt^2} + \alpha_n \frac{dy_n}{dt} + \omega_n^2 y_n = g(y_1, y_2, y_3, \dots) \quad (13)$$

donde $g(y_1, y_2, y_3, \dots)$ describe la excitación forzada del generador. Si suponemos que éste es lineal, podemos escribir:

$$g(y_1, y_2, y_3, \dots) = c_1(y_1 + y_2 + y_3 + \dots) + c_2\left(\frac{dy_1}{dt} + \frac{dy_2}{dt} + \frac{dy_3}{dt} + \dots\right) \quad (14)$$

Donde C_1 y C_2 son constantes, en una primera aproximación. Sin embargo, en los instrumentos reales el generador es no lineal.

Aunque, por razones de espacio, no podemos discutir las soluciones de la ecuación, vale la pena decir que el ingrediente no-lineal aporta términos forzados de combinaciones de frecuencias:

$$\omega_n \pm \omega_m \quad (15)$$

Todo esto conduce al pensamiento de que los intervalos de frecuencia tan “exactos” relacionados ya sea con la formación del timbre o con los supuestos intervalos “justos” de las escalas o inclusive con las teorías, todas controvertidas, sobre la disonancia y la consonancia, en realidad representan un problema más complejo que lo que comúnmente se refleja en los textos sobre las bases de la música.

EL DOMINIO FRECUENCIA -TIEMPO DE LA MÚSICA

Un análogo del principio de incertidumbre que se postula para las magnitudes de espacio-momento, se postula también para el dominio tiempo-frecuencia, lo que está relacionado con que el tiempo mínimo en que un timbre característico es audible está relacionado con la expresión [11]:

$$\Delta f \Delta t = \text{const.} \quad (16)$$

Por ejemplo, supongamos que tenemos un sonido perfectamente armónico (sinusoidal) y vamos disminuyendo su duración hasta llegar un momento en que la sinusoide logra realizar sólo unos pocos o ni siquiera un ciclo de sinusoide. En ese momento se pierde el sonido característico (timbre) de la señal original y se oye un “click”.

En realidad la música, tanto en melodía como en acordes, está cambiando continuamente sus frecuencias fundamentales, pero además, en cualquier interpretación musical se superpo-

nen una gran cantidad de sonidos de distintos instrumentos musicales. Esto hace que la representación de la señal de audio de amplitud contra tiempo varíe rápidamente en forma complejísima, aunque el sistema oído – cerebro es capaz de “interpretarla”. La transformada de Fourier de esta compleja señal nos da la composición espectral de la señal, de amplitud vs. frecuencia, o sea, armónicos e inarmónicos constitutivos de la señal analizada [20, 21].

Nótese que tenemos dos dominios separados al respecto, uno por síntesis (amplitud-tiempo) y otros por análisis de Fourier (amplitud – frecuencia). Pero en realidad la música se mueve en el dominio frecuencia-tiempo, donde en cada intervalo pequeño de tiempo cambia el oscilograma (espectro) de ese “momento”. Eso ocasiona que la característica fundamental de localización de las componentes de las señales musicales estén en el dominio de tiempo y de la frecuencia. En este sentido la transformada de Fourier, adolece del defecto de que la información espectral que proporciona es global y por el propio principio expresado en (16), existe el compromiso entre la frecuencia y el tiempo, ya que si “clavamos” el tiempo ($\Delta t = 0$), se pierde la información de las frecuencias y si lo hacemos muy “largo” (tendiente a infinito) entonces se definen bien las frecuencias, pero no se sabe en que momento “suena” cada una.

Por ello han aparecido nuevas técnicas para representar señales en el dominio de tiempo-frecuencia que utilizan otras transformadas, como las rápidas de Fourier, las de Gabor en 1946, o los wavelets, con la idea de introducir ventanas para poder observar la parte de la señal presente en algún entorno del punto de estudio [11]. Así se logra, en primer lugar, que las componentes frecuenciales de la señal en aquel instante dependan solamente de las proximidades del punto y no influyan en ellas las partes alejadas de la señal. A diferencia de la transformada de Fourier, las transformadas de Wavelet, pueden definirse con diferentes expresiones, sean continuas o discretas, que permiten el análisis de señales de manera similar a la transformada de Fourier, pero con la diferencia que las de wavelet pueden entregar información temporal y frecuencial en forma casi-simultánea. El principio de incertidumbre impone limitaciones con la resolución en tiempo y frecuencia, pero estas transformadas wavelet permiten estudiar la señal a distintas frecuencias y con diferentes resoluciones. Una gran ventaja sobre la transformada de Fourier es que permiten trabajar con datos que presenten discontinuidades o picos, aspecto importante en señales digitalizadas. En general, poseen innumerables aplicaciones y en las asociadas con las sensaciones de la música en el cerebro, se podrían plantear problemas teóricos y mediciones experimentales de gran actualidad.

CONCLUSIÓN

Cuba es una gran potencia musical en géneros de trascendencia mundial –habanera, boleros, danzón, son, conga, rumba, cha cha cha, mambo, etc.– pero no lo es tanto desde el punto de vista científico-técnico. Pongamos los físicos un granito de arena. Dejamos pendiente debatir por dónde andan aún hoy los “misterios”, que prometen interesantes investigaciones al respecto. Queda abierta la partida.

- [1] P.A.Scholes, *Diccionario Oxford de la Música* (Arte y Literatura, La Habana, 1981).
- [2] M. Rosental, P.Iudin, *Diccionario filosófico* (Ediciones Universal, Argentina, 1973).
- [3] B.I. Spasski, *Historia de la Física* (en ruso) (Universidad de Moscú, Moscú, 1963)
- [4] B. Bower, *Science News* **153**, 215 (1998).
- [5] J. Valenzuela, *Descubriendo MIDI* (Miller Freeman Books, San Francisco, 1995).
- [6] M. Puckette, *Theory and Techniques of Electronic Music* (Univ. of California, San Diego, 2003).
- [7] J. Jeans, *Science and Music* (Cambridge University Press, London, 1953).
- [8] A. Wood, *The Physics of music*, 6th ed. (Methuen & Co., London, 1964).
- [9] J. Askill, *Physics of Musical Sound* (Van Nostrand, New York, 1979).
- [10] H.Massman y R. Ferrer, *Instrumentos Musicales* (Ediciones Dolmen, Santiago de Chile, 1997).
- [11] D. Stolik, *Física y Música* (Editora Citmatel, La Habana, 2005).
- [12] D. Stolik, *Rev. Cub. Fis.* **22**, 164 (2005).
- [13] D. Stolik, *Revista 100cias@uned*, **1**, 83 (2008).
- [14] W.F. Magie, *A Source Book in Physics* (Harvard University Press, Cambridge, Massachusetts, 1969).
- [15] W.C.Sabine, *Collected Papers on Acoustics* (Dover, 1964).
- [16] D. Halliday, R.Resnick y K.S.Krane, *Física*, 4^{ta} ed. (versión Ampliada) (Ed. Revolucionaria, 1992).
- [17] Stevens y Warshofsky, *Sonido y Audición* (Time Inc., Mex. D.F., 1971).
- [18] G. Bekesy, *Experiments in Hearing* (McGraw-Hill, New York, 1960).
- [19] N.H.Fletcher, *Rep.Prog. Phys.* **62**, 723 (1999).
- [20] M. Dörfler, *What Time-Frequency Analysis Can Do to Music Signals* (NuHAG, Institut für Mathematik, Univ. Wien, 2004).
- [21] J.M.Vuletic, *Nuevas bases para el procesamiento de música en el dominio de tiempo-frecuencia*. (Dto de Computación., Fac.de Ciencias Exactas y Nat. Univ. de Buenos Aires, 2005)

NUESTRA FÍSICA EN NOTICIAS

CELÉBRASE ACTO DE APERTURA DEL AÑO JUBILAR POR EL CENTENARIO DEL NATALICIO DEL DR. ROBERTO J. SOTO DEL REY

Convocado por el Departamento de Física de la Facultad de Ciencias Naturales de la Universidad de Oriente y la filial de la Sociedad Cubana de Física en Santiago de Cuba, el pasado viernes 9 de marzo del 2012, a las 2:00 p.m., en el exterior del Museo de Historia de la Universidad de Oriente, se congregaron miembros de la comunidad universitaria, ex-alumnos, ex-colegas de trabajo, amistades y demás interesados, para participar en el Acto de Apertura del Año Jubilar en conmemoración del centenario del natalicio del Dr. Roberto Joaquín Soto del Rey. Se rindió, así, el merecido homenaje a este abnegado, clarividente y estoico profesor, patriota y fundador de la Universidad de Oriente y de su actual Departamento de Física.

Presidieron el acto el Dr. Bernardo Reyes Tur, decano de la Facultad de Ciencias Naturales, el Dr. Francisco Palacios Fernández, Jefe del Departamento de Física de la mencionada Facultad, y los Profesores Titulares MSc. Luis M. Méndez Pérez e Ing. Eduardo J. Roca Oria, dos de los primeros graduados de Ingeniería Física de la Universidad de Oriente y quienes tuvieron a su cargo las disertaciones inaugurales de este año Jubilar.

El profesor Méndez, realizó un esquicio histórico del desarrollo de la Física en la Universidad de Oriente, desde su fundación en octubre de 1947, cuando el Dr. Roberto Soto del Rey ocupa la primera Cátedra de Física, impartiendo la Física Superior en el primer curso de la Carrera de Ingeniería Química Industrial, hasta el presente en que la Licenciatura en Física es una carrera acreditada de excelencia, destacando que se tiene un buen promedio de artículos publicados y participación en eventos por profesor del claustro de la carrera, se imparte un programa de Maestría en Ciencias Físicas, se tiene intercambio científico con siete universidades y un centro de investigación de España, Brasil, etc.

Destacó que hoy existen los Centros de Biofísica Médica y el Centro de Electromagnetismo Aplicado, en los cuales se conjugan armónicamente las investigaciones aplicadas de la Física a las Ciencias de la Vida, de las cuales Soto del Rey fue promotor, cuando inició la impartición de cursos de Física, a fines de los años 60 del siglo pasado, en las entonces Escuelas de Medicina y de Biología de nuestra Universidad. Que, en todo ese desarrollo ascendente de la Física en la Universidad de Oriente, disciplina que también cumple su 65 aniversario el próximo año, ha estado presente, desde sus inicios, la personalidad del profesor Dr. Roberto Joaquín Soto del Rey: hasta su jubilación en el año 1992, de forma directa y personal, en la formación de muchas generaciones de ingenieros, médicos, licenciados y físicos. Que este Año Jubilar es una invitación a participar en un año de alegría, de regocijo por el desarrollo de la Física en Universidad de Oriente, cuya semilla está en la personalidad del

Dr. Roberto Soto del Rey, siendo una ocasión oportuna para esforzarse en recordar los inicios, con el fin de conocer la historia para comprender el presente y proyectarse al futuro.

El profesor Eduardo Roca, por su parte, se refirió a la personalidad del Dr. Roberto Soto del Rey expresando, entre otras cosas, que éste no restringió su quehacer al plano académico, ya que, desde la época del machadato, se rebeló contra la injusticia. Desde entonces, enarboló las banderas del progreso social, ya en su condición de estudiante, o como profesor de la enseñanza media y universitaria, participando en la organización de huelgas contra los dictadores de turno, luchando por un nuevo edificio para el Instituto de Segunda Enseñanza de Santiago de Cuba (el actual “Cuqui Boch”), negándose a una universidad retrógrada, abogando por una universidad científica y popular.

Añadió que el Dr. Roberto Soto del Rey, en colaboración con el Dr. Luis Amado Aguilar Salcedo, en septiembre de 1961 publica la obra “Tensión superficial y Soluciones Líquidas”, con la cual el Departamento de Física inicia la publicación del Curso de Física que se imparte a los que estudian ingeniería en la Universidad de Oriente. En los años siguientes se publican otros tomos: “Estática”, “Cinemática”, Hidrodinámica” y, en 1966, “Vibraciones y Ondas”. Ya en la década de los años 80, publica “Problemas de Mecánica”, como texto de sus excelentes cursos de Mecánica Teórica para la carrera de Física y también lo que puede considerarse su obra cumbre, “Introducción a la Biofísica”, en cuatro tomos, por la editorial Oriente, en la que resume su excelsa labor como profesor de Física y de Biofísica, iniciada en 1968, en las Escuelas de Biología y de Medicina de la Universidad de Oriente.

Destacó que el Dr. Soto del Rey tuvo una vida dedicada por entero, estoicamente, a la enseñanza (“desde que le conocimos, nunca disfrutó de vacaciones y nunca se enfermó”), labor que se nutrió de su incansable afán de saber, de beber el conocimiento de muchas fuentes, lo que le hizo poseedor de una sólida cultura cultura que empleó, unida a un fuerte carácter, a un sentido del humor muy penetrante – en ocasiones, hiriente – y a un valor personal excepcional, para fustigar a todas las lacras sociales que se ponían a su alcance: “...Para mí, la cultura es un látigo”, le dijo, en cierta ocasión, el Dr. Soto al expositor.

En el marco de las actividades de este Año Jubilar nos proponemos: 1) dictar conferencias científicas con temas relacionados con la enseñanza de la física, biofísica, física médica y otras aplicaciones de la física, que eran las temáticas a las que más atención prestó y en las que sentó cátedra en la Universidad de Oriente; 2) celebrar

periódicamente coloquios o conversatorios en los que los participantes puedan exponer sus vivencias relacionadas con el profesor Roberto Soto del Rey; 3) recopilar esos materiales y, con otros ya publicados, imprimir un compendio; 4) incluir este Año Jubilar dentro de las actividades por el 65 aniversario de la fundación de la Universidad de Oriente 5) escanear y conformar una biblioteca virtual en formato PDF con los libros que publicó de su Curso

de Física en la década de los años sesenta, en colaboración con el Dr. Luis Aguilar Salcedo (el de Introducción a la Biofísica y el de Problemas de Mecánica) para que formen parte del patrimonio de nuestra biblioteca virtual., etc. El Año Jubilar concluirá el 4 de marzo de 2013 con un acto solemne y un encuentro de graduados de Física de nuestra universidad.



Momentos del acto central por el jubileo del Dr. Roberto Soto del Rey (a) Presidencia del acto. De izquierda a derecha: Dr. Bernardo Reyes-Tur (decano de la Facultad de Ciencias Naturales de la UO), Msc. Luis Méndez-Pérez (presidente de la Comisión Organizadora por el Año Jubilar), Ing. físico Eduardo J. Roca (secretario de la misma Comisión) y Dr. Francisco Palacios-Fernández (Jefe del Departamento de Física de la Facultad de Ciencias Naturales de la UO) (b) Un estudiante se suma a la presidencia como parte de la velada cultural celebrada durante el mismo acto. (c) Parte del público asistente. En primer plano, la profesora María C. Campistrous, colaboradora del Dr. Soto del Rey en los 1960's.

L. M. Méndez Pérez, E. J. Roca Oria
Departamento de Física, Facultad de Ciencias Naturales, Universidad de Oriente



DE SANTIAGO DE CUBA, A PRESIDENTE DEL CLAF

Proveniente de Santiago de Cuba, y con una larga y fructífera trayectoria como físico en La Universidad de La Habana, Carlos Trallero-Giner ha sido el primer cubano que ocupará el cargo de Presidente del Centro Latinoamericano de Física (CLAF). El también Premio Nacional de Física 2011 fue elegido por votación entre un total de 8 candidatos, durante la trigésimo segunda reunión extraordinaria del CLAF, que tuvo lugar en México el día 13 de abril del 2012 –así lo anunció el Dr. Ernesto Estévez, representante cubano ante el CLAF. Se trata de una extraordinaria muestra del prestigio de Trallero dentro de la comunidad física latinoamericana, así como de la madurez y sentido de equipo de la Física cubana, que supo unir esfuerzos de varias de sus instituciones para realizar y defender la propuesta.

Prof. Carlos Trallero-Giner

Ernesto Altshuler

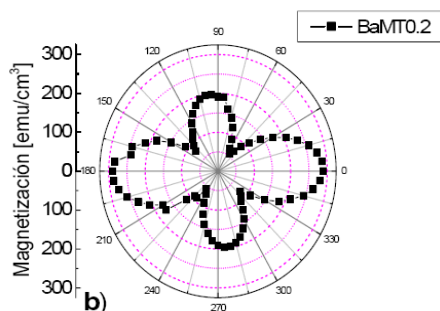


Diagrama polar de magnetización vs. ángulo de giro medida sobre una ferrita Ba-M, con un magnetómetro construido por el autor de la tesis “Estudio de la hexaferrita de bario tipo M. Predicciones y resultados experimentales”.

MAGNETISMO Y VIDA EN LA VÍA LÁCTEA

El 15 de febrero de 2012 se defendieron dos tesis de doctorado que versaban sobre dos campos de la Física bien distantes entre sí. La primera, “La foto-biofilia de la Vía Láctea”, por Osmel Martín González, de la Universidad Central de Las Villas, fue tutorada por Rolando Cárdenas Ortiz y Jorge Ernesto Horvath. La segunda fue defendida por Pedro Antonio Mariño, de la Universidad de Oriente, con el título “Estudio de la hexaferrita de bario tipo M. Predicciones y resultados experimentales”, y fue tutorada por Ernesto Govea.

Ernesto Altshuler

NANO PARA TODOS

El VI Taller Iberoamericano de Enseñanza de la Física Universitaria se celebró en el Colegio Mayor de San Gerónimo, en La Habana (Cuba), del 30 de enero al 3 de febrero de 2012. Con participantes de Alemania (1), Angola (7), Colombia (3), Cuba (53), Ecuador (4), España (10), México (9), Portugal (1) y Venezuela (2).

El Taller Iberoamericano tiene como objetivo mantener un espacio donde discutir los problemas actuales de la enseñanza de la física en nuestros países. Ofrece cabida a todas las temáticas, desde la “alfabetización científica”, hasta temas puramente académicos, con especial énfasis en el empleo de las TIC, la aplicación de la computación, su vínculo con las Ciencias para la Vida, así como los problemas que se plantean al enseñar física en otras carreras científicas. Dando continuidad a los talleres anteriores, el VI Taller estuvo dedicado al debate *Las experiencias actuales en la enseñanza de las Nanociencias y las Nanotecnologías*.

La charla inaugural estuvo a cargo del profesor Fausto Sanz, de la Universidad de Barcelona, España, con el título “Nano-

ciencia: disciplina o herramienta transversal”.

Las otras charlas fueron de temas diversos relacionados con el quehacer del profesor universitario. Hubo información de las actividades que se realizan en países concretos, pero que pueden ser utilizados por todos los asistentes al Taller.

El profesor Sebastián Dormido Bencomo de la Universidad Nacional de Educación a Distancia, España, presentó el minitaller “El Portal UNEDLabs: red de laboratorios virtuales y remotos en la UNED”.

Se celebraron dos mesas redondas dirigidas a:

Cómo hacer llegar a la sociedad los avances de la nanotecnología.

Enseñanza de las matemáticas para las físicas.

Los apoyos financieros fundamentales que permitieron la celebración del evento vinieron del Centro Latinoamericano de Física (CLAF) y de la Fundación Eduard Job de Alemania.

Octavio Calzadilla
Facultad de Física, UH

MÁS SOBRE LA ENSEÑANZA DE LA FÍSICA

Del 19 al 23 de marzo del 2012 se desarrolló, en el palacio de las Convenciones de La Habana, el XII Taller Internacional sobre la Enseñanza de la Física en el marco del VII Congreso Internacional Didácticas de las Ciencias. Los organizadores principales de dichos eventos fueron Eduardo Moltó Gil y Carlos Sifredo Barrios, respectivamente.

En el referido taller, se impartieron 3 conferencias, 23 carteles y 36 comunicaciones orales sobre las temáticas siguientes: el uso de las TICS en la enseñanza de la Física, vías no formales de enseñanza de la Física, la enseñanza de la Física en la educación general y superior, cuestiones generales de la enseñanza de la Física, y la formación y capacitación de profesores

de Física. Asociado al taller se impartió el curso “El Trabajo Experimental Asistido por los Recursos Informáticos en la Enseñanza de la Física”.

En el taller participaron colegas de Argentina, Brasil, Colombia, Costa Rica, Cuba, España México, República Dominicana

y Venezuela. El VII Congreso Internacional Didáctica de las Ciencias contó con el auspicio de la UNESCO y la OEI, y en particular, el XII Taller contó, además, con el auspicio de la Red Latinoamericana sobre Educación en Física y la Sociedad Cubana de Física.

Eduardo Moltó Gil
Ministerio de Educación

MARCHCOMETING'12: SISTEMAS COMPLEJOS EN LA HABANA

El destacado físico norteamericano Leo Kadanoff, de la Universidad de Chicago, impartió la primera charla del evento “Complex Matter Physics: materials, dynamics and patterns” (MarchCOMeeting'12), con la charla “Synchronization: a simple process?”. Los principales temas tratados fueron los medios granulares, los fluidos complejos, la microfluídica, y sistemas complejos biológicos examinados desde una óptica física.

El evento se desarrolló entre el 6 y el 9 de marzo del 2012 en el Hotel “Ambos Mundos”, de la Habana vieja, y también en el Colegio Mayor de San Gerónimo y en el Aula Magna de la Universidad de La Habana. Contó con la participación de 23 cubanos y 53 extranjeros, donde destacó la participación de Noruega (17 participantes), Francia (16 participantes) y Estados Unidos (8 participantes). Ha constituido el mayor

encuentro histórico entre Noruega y Cuba en la campo de la Física –subrayado en unas palabras en la sesión inaugural por parte del del embajador de ese país en Cuba. MarchCOMeeting'12 abrió un importante espacio para los jóvenes físicos cubanos vinculados al tema de los fenómenos complejos, que presentaron 7 charlas y 14 posters –el evento costó la impresión de 10 de ellos. Vale destacar la celebración de la Mesa Redonda “Complex Systems: doing cutting-edge physics on a low budget”, donde se discutieron vías para apoyar a la Física Cubana, y donde se presentó el último número de la Revista Cubana de Física.

El Centro de Estudios Avanzados de la Academia de Ciencias Noruega (CAS), y el ICTP dieron apoyo material al evento, cuyos organizadores principales fueron J. O. Fossum y T. H. Johansen, por la parte noruega, y E. Altshuler, por la cubana.



Leo Kadanoff, como presidente de la comisión de selección de posters, felicita a Anier Hernández por haber obtenido el Premio al Mejor Poster, con el título “A rheological model based on nonlocal relations between shear stress and velocity gradients for complex fluids”. El trabajo fue el producto de la colaboración de Anier con Oscar Soto-longo –ambos de la Facultad de Física, Universidad de La Habana. En la foto, al fondo, Jon Otto Fossum terminando de leer el acta de premiación

(Foto: O. Ramos)

Ernesto Altshuler

MATERIALES EN LA ERA DE LA CONVERGENCIA

Si bien el MarchCOMeeting ha sido considerado dentro y fuera de Cuba como un éxito, su celebración no hubiera sido posible sin haber sido “apadrinado” –como “reunión satélite”– por la conferencia “Nuevos Materiales en la Era de la Convergencia”, organizada por el Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE) de la Universidad de La Habana, que tuvo lugar de 12 al 15 de marzo en el Colegio Universitario San Gerónimo de La Habana.

Contó con la presencia de un centenar de científicos de Cuba y de invitados de casi todos los continentes: México, Brasil, Colombia, Venezuela, Reino Unido, España, EEUU, Austria, Noruega, Finlandia y Malasia. Fue una dinámica

semana de intercambio científico y debates sobre avances y perspectivas de la ciencia de los materiales y las nanotecnologías en su confluencia con otras ramas de las ciencias naturales: se habló, desde la simulación computacional, hasta la biomimética, desde la física de la materia condensada, hasta la fotosíntesis artificial y la materia activa. Se discutió sobre materiales sintéticos; nanoestructuras semiconductoras, nanotubos de carbono, polímeros conductores, arcillas, y materiales magnetocalóricos. Todos estos temas fueron expuestos en un escenario internacional que logró la convergencia de investigadores de diversas ramas de las ciencias naturales.

Beatriz Concepción
IMRE, UH

...Y MÁS CONVERGENCIA: BIOLOGÍA, FÍSICA Y QUÍMICA

El salón “Solidaridad” del Hotel Habana Libre fue el sitio escogido para la reunión “Retos y fronteras de la Física y la Química en la biología moderna”, del 18 al 21 de marzo de 2012. Participaron 149 físicos, químicos y biólogos de 9 países, incluida Cuba. La reunión, financiada por la prestigiosa fundación alemana Alexander von Humboldt, constituyó el 4to Humboldt Kolleg organizado en Cuba por el Club Humboldt de nuestro país. En esta ocasión, los organizadores, Emanuel C. Mora y Vivian Morera, ambos Humboldtianos de la Facultad de Biología, decidieron crear un espacio de discusión inter-disciplinario en el que el objeto de análisis fuera la Biología Moderna, y las fuentes que lo nutrieran, la Física y la Química. El encuentro fue calificado de excelente por los participantes cubanos y extranjeros, y por la directiva de la fundación Humboldt.

El 18 de marzo, “Retos y Fronteras de la Física y la Química en la Biología Moderna” comenzó con la Conferencia Magistral

“On the role of electronically excited states in thermal reactions: The two-state reactivity concept” (foto adjunta), impartida por el Presidente de la Fundación Humboldt, Prof. Dr. Helmut Schwarz. Durante los próximos tres días, el evento mantuvo dos sesiones en paralelo, una dedicada a “Física” y la otra a “Química”. Una treintena de físicos de Alemania, Argentina, Brasil, Canadá, Cuba, Rusia, Singapur, USA y Venezuela presentaron y discutieron trabajos que emplean la física en áreas de la biología moderna como biofísica, neurociencias, modelación fisiológica y navegación animal. El evento se destacó por la participación de jóvenes investigadores, entre los que no faltaron los estudiantes de pregrado de las facultades de física, química y biología, de la Universidad de La Habana. Eventos como este revelan estratégicas oportunidades de colaboración entre las ciencias “duras” y las ciencias de la vida, algunas de las cuales fueron aprovechadas durante “Retos y Fronteras...” para establecer nuevas alianzas de investigación inter-disciplinaria.



El Prof. Dr. Helmut Schwarz, Presidente de la Fundación Alexander von Humboldt, impartió la conferencia magistral de apertura del evento. Foto: Yovany Silva

(Foto: E. Mora).

Emanuel Mora
Facultad de Biología, UH

EL “LUCASNÓMETRO” : ¿UN NUEVO INSTRUMENTO DE LA FÍSICA?

En su búsqueda de una nueva imagen de la Física en Cuba, el presidente de la Sociedad Cubana de Física, Augusto González, impulsó la idea de crear el video-clip “Electrobacteriando”, que se espera en el popular espacio “Lucas” de la TV cubana. El audiovisual –que cuenta con una banda sonora original, una cantante solista, varios miembros del BNC, y la “actuación especial” de algunos colegas– se basa en un video

sobre experimentos de manipulación de bacterias E. Coli mediante pinzas ópticas realizado por miembros de la Facultad de Física y del IMRE (Universidad de La Habana). El proceso de producción –en el que se involucró bien de cerca el propio Augusto González– resultó extremadamente complejo... un esfuerzo que se podría ver sometido –esperemos que para bien– a la compleja prueba del “Lucasnómetro”.



En un descanso durante la filmación de “Electrobacteriando” (teatro “Mella”, 21 de noviembre de 2011). De izquierda a derecha: Augusto González, Lenin del Río (Facultad de Física, UH), Lester Moreira (IMRE, UH) y Gustavo Sánchez (Facultad de Física, UH), rodeados de algunos “instrumentos científicos” prestados por la Facultad de Física y el Grupo de Superconductividad del IMRE para la filmación

(Foto: A. González)

Ernesto Altshuler

PREMIO NACIONAL DE FÍSICA 2012 PARA ALEJANDRO CABO

El Premio Nacional de Física “Manuel F. Gran” recayó este año en Alejandro Cabo Montes de Oca (ICIMAF), por su labor de más de 40 años al servicio de la Física cubana. Su quehacer incluye la publicación de más de 80 artículos científicos, la dirección de buena cantidad de trabajos de Diploma, maestría y doctorado, y un largo historial vinculado a la preparación de estudiantes de preuniversitario para olimpiadas internacionales de Física. Entre otros reconocimientos,

Cabo ha recibido la orden “Carlos J. Finlay”, y ha sido autor de 5 premios anuales de la Academia de Ciencias de Cuba. No es exagerado decir que es uno de los físicos cubanos con un conocimiento más amplio y profundo de su ciencia, cuyos logros más conocidos han tenido lugar en el campo de la teoría, pero que también ha incursionado con éxito en el terreno de la física experimental.



Alejandro Cabo (con camisa oscura) se aproxima al presidente de la Sociedad Cubana de Física, Augusto González, para recibir el Premio Nacional de Física “Manuel F. Gran” 2012. La escena tuvo lugar en el Aula Magna de la Universidad de La Habana el martes 3 de abril de 2012. Tras la entrega, el homenajeado impartió una conferencia magistral a los presentes, entre los que se encontraban varios de los premiados en el año 2011

(Foto: E. Altshuler)

Ernesto Altshuler

CARTA AL EDITOR DE LA REVISTA CUBANA DE FÍSICA

Al revisar el artículo de referencia (Rev. Cub. Fis. **28**, 128 (2011)) sobre el artículo "EXPERIENCIA EN EL DESARROLLO..."¹, por más esfuerzos realizados no logro encasillarlo. Parece una especie de crónica histórica, muy deficiente por falta de datos específicos; faltan muchas respuestas a ¿Quién? ¿Dónde? ¿Cuándo? ¿Cómo? ¿Por qué?

1. Obviamente no es un 'original paper'; no hay novedad científica.

2. No es un artículo de revisión, pues no hay una sola referencia de revistas arbitradas sobre láseres, óptica o similar. Excepto tres libros -no recientes- las referencias son de eventos científicos, donde se sabe muy bien que el arbitraje es usualmente mínimo o nulo.

3. No es un artículo de divulgación: no aparecen esquemas de funcionamiento del láser, su fundamento teórico, ni avances recientes en el tema. Solo la foto externa de un equipo. Se menciona una Tabla inexistente (que, de existir, no excusaría

lo anterior).

4. No se puede considerar un anuncio comercial, pues aunque resulta autoelogioso y no crítico, como es usual en cualquier publicidad, las características técnicas del producto no se mencionan.

5. Se hace énfasis en los resultados obtenidos al aplicar el equipo durante muchos años, pero no aparece un solo artículo de autor nacional o extranjero en alguna revista médica reconocida que los avale. Al parecer Tina Karu no tiene artículos en revistas médicas especializadas, sólo un libro. ¿De 1998 a la fecha no han aparecido otras publicaciones?

6. La propaganda a la acupuntura es infundada y tendenciosa. Se alega como demostración CRITERIOS de estudiantes y especialistas, no artículos científicos. Absurdo.

7. En resumen, a mi modo de ver, el referido escrito es un buen ejemplo de lo que no debe ser un artículo publicado en una revista científica internacional cubana.

Arnaldo González Arias
Dr. en Ciencias Físicas

RESPUESTA DE LOS AUTORES

Estimado editor:

El trabajo criticado por el Dr. González no pretende ser un artículo original, de divulgación, o de propaganda comercial: eso no es lo que se espera de un trabajo publicado en la sección "Momentos de la Física en Cuba". Siguiendo el criterio editorial, dicha sección brinda la oportunidad, entre otros aspectos, de llevar la Física cubana de impacto social –incluyendo su historia reciente– a nuestra comunidad.

Ciertamente varias referencias citadas en nuestro artículo han sido publicadas (incluso por la propia Revista Cubana de Física) en memorias de los eventos internacionales "TECNOLÁSER": es lamentable que el Dr. González ponga en tela de juicio el rigor de su arbitraje. Para compensar, nos complace informar que la investigadora rusa Tina Karu ha publicado más de 350 artículos científicos, con más de 3000 citas según el Web of Science : para no abrumar al lector, decidimos citar sólo uno de sus libros, considerado clásico en la materia. Aceptamos que podríamos haber citado referencias en revistas internacionales para sustentar

el uso terapéutico del láser. No lo hicimos por considerarse la terapia láser una técnica establecida y reconocida universalmente, a la que se dedican íntegramente revistas reconocidas, como *Lasers in Medical Science*.

El calificativo de "auto-elogioso" expresado por el Dr. González no se destaca por su objetividad: un lector desprejuiciado fácilmente constatará que casi tres décadas de trabajo sostenido se han descrito en nuestro artículo con casi absoluta ausencia de "adjetivos elogiosos".

La "propaganda a la acupuntura [...] infundada y tendenciosa" de que se nos acusa, aparentemente está asociada a una oración en las Conclusiones: invitamos al lector a releer el artículo y decidir sobre la objetividad de esta crítica.

Finalmente, la Tabla mencionada no apareció por un lamentable error editorial, y se ofrece al final de esta respuesta.

¹ EXPERIENCIA EN EL DESARROLLO E INTRODUCCIÓN DE EQUIPOS DE TERAPIA LÁSER DE BAJA POTENCIA, Andrés M. Combarro Romero, Omar Morales Valdés, Carlos A. Corcho Corcho, Alina A. Orellana Molina, Adel Hernández Díaz, Agustín Porrúa García, Sandra Fernández Yanes, Pedro J. Larrea Cox, Mario Aparicio Carriera, Jossué Arteché Díaz

Andrés M. Combarro Romero, Omar Morales Valdés, Carlos A. Corcho Corcho, Alina A. Orellana Molina, Adel Hernández Díaz, Agustín Porrúa García, Sandra Fernández Yanes, Pedro J. Larrea Cox, Mario Aparicio Carriera y Jossué Arteche Díaz

Centro de Aplicaciones Tecnológicas y Desarrollo Nuclear (CEADEN), La Habana, Cuba
20/02/2012

Tabla I
Desarrollo de equipos de las familias LASERMED y FISSEER.

AÑO	MODELO	LÁSER	LONGITUD DE ONDA(NM)	POTENCIA(MW)	MODO
1987	LASERMED 1	HeNe	632.8	2	Continuo
1988	LASERMED 101	HeNe	632.8	2	Continuo
1988	FISSEER I	HeNe	632.8	25	Continuo
1989	LASERMED 121	HeNe	632.8	7	Continuo
1990	LASERMED 401	Diodo semiconductor	904	7 (media)	Pulsado
1990	LASERMED 122	HeNe	632.8	7	Continuo
1990	LASERMED 101M	HeNe	632.8	2	Continuo
1991	LASERMED 102	HeNe	632.8	2	Continuo
1991	FISSEER II	HeNe	632.8	25	Continuo
1992	LASERMED 401M	Diodo semiconductor	904	7 (media)	Pulsado
1992	LASERMED 101MX	HeNe	632.8	2	Continuo
1994	LASERMED102 MX	HeNe	632.8	2	Continuo
1995	FISSEER III	HeNe	632.8	25	Continuo
1995	LASERMED 101MD	HeNe	632.8	2	Continuo
1996	LASERMED 102MD	HeNe	632.8	2	Continuo
1996	LASERMED 670	Diodo semiconductor	670	40	Continuo
1996	LASERMED 830	Diodo semiconductor	830	45	Continuo
2000	FISSEER 25	Diodo semiconductor	650	20	Continuo
2002	FISSEER 21	Diodo semiconductor	650, 830	20, 40	Continuo
2004	FISSEER FS904	Diodo semiconductor	904	10 (media)	Pulsado

ERRATA EN Rev. Cub. Fis. **28**, 128 (2011).

Estimado Editor

En nuestro trabajo de referencia, los valores de los parámetros de los potenciales LJ(6-12) mostrados en la Tabla I son erróneos. En la primera columna de valores, de arriba hacia abajo, los datos correctos son 84, 161 y 136, y en la segunda son 3,40, 3,98 y 3,65. Estos errores se cometieron al transformar las unidades del código. Los números no modifican los resultados básicos y conclusiones del artículo.

Cordialmente,
R. Lozada-García y G. Rojas-Lorenzo
InSTEC, La Habana, Cuba
07/06/12