

FÍSICA

REVISTA CUBANA DE FÍSICA

FÍSICA

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

VOL.29 No.2
DICIEMBRE, 2012

MEDIO SIGLO GRADUANDO FISICOS



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 Grande do Sul
cesarzen@cesarzen.com

EDICIÓN ELECTRÓNICA

R. CUAN
Facultad de Física, Universidad de La Habana
rcuan@fisica.uh.cu

J. J. GONZÁLEZ
Facultad de Física, Universidad de La Habana
jjgonzalez@fisica.uh.cu

DISEÑO

ERNESTO ANTÓN
E. ALTSHULER

COORDENADAS

- 51 **TRAS MEDIO SIGLO**
M. Sánchez-Colina y E. Altshuler

ARTÍCULOS ORIGINALES

- 52 **TERAHERTZ ABSORPTION BY EXCITONIC POLARITONS**
[ABSORCIÓN EN LOS TERAHERTZ POR POLARITONES EXCITÓNICOS]
Carlos Andrés Vera-Ciro, Alain Delgado and Augusto González
- 57 **PROPIEDADES PIEZOELECTRICAS DE CERÁMICAS FERROELÉCTRICAS DE $Pb(Zr,Ti)O_3$ DOPADAS CON SR Y FE**
[PIEZOELECTRIC PROPERTIES OF FERROELECTRIC CERAMIC $Pb(Zr,Ti)O_3$ DOPED WITH SR AND FE]
F. A. Londoño, D. J. López, M. H. Lente, J. A. Eiras y D. Garcia
- 62 **LA CULTURA CIENTÍFICA Y LA DESFACTUALIZACIÓN DE LA ENSEÑANZA DE LA FÍSICA**
[THE SCIENTIFIC CULTURE AND THE DEFACULTUALISATION OF PHYSICS TEACHING]
F. A. Horta Rangel y A. González Arias
- 70 **SPONTANEOUS STRAIN AS ORDER PARAMETER TO DESCRIBE THE PHASE TRANSITION IN La^{3+} DOPED $PbTiO_3$ FERROELECTRIC PEROVSKITE**
[LA DEFORMACIÓN ESPONTÁNEA COMO PARÁMETRO DE ORDEN PARA DESCRIBIR LA TRANSICIÓN DE FASE EN LA PEROVSKITA FERROELÉCTRICA $PbTiO_3$ DOPADA CON La^{3+}]
Y. Méndez-González, A. Pentón-Madrigal, A. Peláiz-Barranco and F. Calderón-Piñar

ARTÍCULOS DE REVISIÓN

- 74 **DINÁMICA ESTRUCTURAL FOTOINDUCIDA EN SÓLIDOS DE GASES NOBLES**
[PHOTOINDUCED STRUCTURAL DYNAMICS IN NOBLE GAS SOLIDS]
A. Martínez Mesa y L. Uranga Piña

MOMENTOS DE LA FÍSICA EN CUBA

- 90 **50 AÑOS DE LICENCIATURA EN FÍSICA EN CUBA**
[50 YEARS OF DEGREE IN PHYSICS IN CUBA]
O. de Melo y M. Sánchez-Colina

- 96 **LECTIO HONORIS CAUSA EN CIENCIAS FÍSICAS**
[LECTIO HONORIS CAUSA EN CIENCIAS FÍSICAS]
F. Leccabue

PARA FÍSICOS Y NO-FÍSICOS

- 102 **A PROPÓSITO DEL TRÁNSITO DE VENUS DEL 5 DE JUNIO DE 2012**
[CONCERNING JUNE 5, 2012 VENUS' TRANSIT]
A. L. Méndez Berhondo

- 105 **NUESTRA FÍSICA EN NOTICIAS**

PORTADA: Diploma en mano, los recién graduados de Licenciatura e Ingeniería Física del curso 2011-2012, se retratan en el Aula Magna de la Universidad de La Habana. Al centro, en la fila trasera, la Dra. María Sánchez-Colina, decana de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana.

TRAS MEDIO SIGLO

Cuando se creó la carrera de Física en Cuba en 1962 a raíz de la Reforma Universitaria Cubana, el contexto internacional era muy favorable para nuestra disciplina. La Física contaba con gran reconocimiento, y recibía especial atención por parte de los gobiernos. Por sólo citar un ejemplo, en 1957 la entonces Unión Soviética puso en órbita el primer satélite espacial (*Sputnik 1*), y en Estados Unidos sintieron que se estaban quedando peligrosamente rezagados en el terreno científico. En respuesta a esta amenaza, entendieron que debían reformular su sistema de enseñanza –en particular de la Física: el gobierno norteamericano destinó millones de dólares a financiar el llamado *Physical Science Study Committee* (PSSC). La primera edición del texto asociado apareció en 1960, y tuvo gran impacto a nivel mundial.

Fue en este contexto en el que 14 gobiernos de Latinoamérica deciden crear en 1962 el Centro Latinoamericano de Física (CLAF), organización de avanzada en su época y con características muy peculiares, que aún mantiene. En Cuba también se prestó especial atención al desarrollo de la Física: así, en 1960, se enviaron los primeros jóvenes a estudiar esta ciencia a la Unión Soviética.

Antes de la Reforma Universitaria, la investigación en Física en Cuba era prácticamente inexistente. Un aspecto esencial su desarrollo fue la colaboración internacional. En la década de los 60 científicos de diversos países como Francia Italia, Inglaterra, México y Argentina, estimulados por el impacto de la revolución cubana, vinieron a la Cuba de manera voluntaria a impartir cursos y desarrollar los primeros laboratorios de investigación. Así surgieron las escuelas de verano organizadas de 1968 a 1972 en la entonces Escuela de Física de la Universidad de la Habana.

Es de todos sabido el tiempo y esfuerzo que supone la formación de científicos. Sin embargo, en poco más de una década la Universidad de la Habana (UH) y la Universidad de Oriente (UO) fueron capaces de formar claustros capacitados no sólo para ejercer la docencia, sino también para la realización de investigaciones científicas de alto nivel. A fines de los 70's se construyeron diodos, circuitos integrados, transistores, celdas solares de silicio, detectores magnéticos de efecto Hall y diodos emisores de luz, entre otros dispositivos de avanzada para la época. A fines de los 80's, se logró sintetizar en Cuba superconductores de alta temperatura crítica prácticamente al unísono de los países más desarrollados. Los físicos cubanos eran reconocidos en Latinoamérica por trabajar en problemas experimentales de avanzada, cuando en la mayoría de los países de la región se hacía sobre todo Física Teórica.

Hoy, en la era de la Nanotecnología, la Física en Cuba vive tiempos difíciles. La crisis de los 90's y la consecuente falta de recursos y equipamiento afectaron considerablemente las posibilidades experimentales, interrumpiendo muchas de las actividades de avanzada que se realizaban en el país. Sin embargo, los físicos seguimos

desarrollándonos: hemos diversificado nuestras líneas de investigación, y seguimos obteniendo resultados. En estos tiempos, una vez más, nos hemos apoyado en la colaboración internacional, donde el CLAF y el Centro Internacional de Física Teórica "Abdus Salam" (ICTP) han sido claves en el financiamiento de proyectos, eventos y becas para el desarrollo de nuestros recursos humanos.

Analizando cómo hemos sido capaces de lograr estas cosas, estamos convencidos de que se debe a nuestra pasión, la pasión con la hacemos nuestro trabajo, esa pasión que mantenemos a pesar de las adversidades.

A nivel internacional este año está también lleno de celebraciones relacionadas con la Física. 2012 ha sido designado como el Año Internacional de la Energía Sostenible para todos. La prestigiosa revista *Applied Physics Letters* cumple sus 50 años de existencia. El CLAF celebra sus 50 años, y para nuestro regocijo, en el mes de abril fue electo como presidente de esta institución, el Dr. C. Carlos Trallero Giner, lo que sin dudas constituye otro reconocimiento a la Física cubana.

Para agasajarnos en esta celebración, hasta los astros se pusieron de acuerdo, y el pasado 5 de junio, Venus pasó frente al Sol –fenómeno que se observaron nuestros físicos a todo lo largo y ancho de la isla, como verán en las páginas de este número de la Revista Cubana de Física. Por si ello fuera poco, el pasado 4 de julio, investigadores del CERN en Ginebra nos anunciaron el descubrimiento del bosón de Higgs, base del modelo estándar.

En el presente número de la Revista Cubana de Física hemos incluido algunos artículos y noticias que, si bien acusan un carácter un tanto ecléctico, conforman un buen mosaico de lo que han representado estos 50 años. En el medio de las carencias diarias y de la diáspora que nos desgarran, mirando hacia el cielo con la facilidad de quien hoy no tiene su propio techo, le ofrecemos a nuestros lectores este número de reafirmación y de necesario optimismo. Creemos que no es totalmente lógico y coherente, porque los físicos no siempre extrapolamos la lógica y la coherencia hacia la vida –según afirman muchos amigos y también algunos enemigos. Es que no podríamos esperar tal cosa de un corazón que late aceleradamente desde hace medio siglo.

Maria Sánchez-Colina
Decana
Facultad de Física, Universidad de La Habana

Ernesto Altshuler
Editor
Revista Cubana de Física

TERAHERTZ ABSORPTION BY EXCITONIC POLARITONS

ABSORCIÓN EN LOS TERAHERTZ POR POLARITONES EXCITÓNICOS

CARLOS ANDRÉS VERA-CIRO^a, ALAIN DELGADO^b AND AUGUSTO GONZÁLEZ^{c†}

a) Kapteyn Astronomical Institute, University of Groningen, P.O. Box 800, 9700 AV Groningen, The Netherlands

b) Centro de Aplicaciones Tecnológicas y Desarrollo Nuclear, Calle 30 No 502, Miramar, CP 11300, La Habana, Cuba

c) Instituto de Cibernética, Matemática y Física, Calle E 309, Vedado, CP 10400, La Habana, Cuba, agonzale@icimaf.cu†

† corresponding author

(Recibido 27/2/2012; Aceptado 3/6/2012)

We use linear response theory in order to compute the light absorption spectrum, in the terahertz band, of a polariton system composed by excitons in a quantum dot very strongly coupled to the lowest photon mode of a thin micropillar. In a thermalized (Bose condensed) system at low temperatures, the spectral function shows a peak associated to a $1s-2p$ like exciton transition, enhanced by polariton effects. On the other hand, in a non-equilibrium system absorption is peaked at low energies. Thus, a measurement of terahertz absorption could give an indication of the degree of thermalization in the polariton system.

La teoría de respuesta lineal es utilizada para calcular el espectro de absorción, en la banda de terahertz, de un sistema polaritónico compuesto por excitones en un punto cuántico fuertemente acoplados al modo fotónico fundamental confinado en un micropilar. En un sistema termalizado (condensado de Bose) la función espectral muestra un pico, asociado a la transición excitónica $1s-2p$, reforzada por efectos polaritónicos. Por el contrario, en un sistema no equilibrado el pico de absorción se localiza a bajas energías. Luego, la medición de la absorción de terahertz podría indicar el grado de termalización de los polaritones.

PACS: Polaritons, 71.36.+c; Absorption spectra of excitons, 71.35.Cc; Electron states and collective excitations in quantum dots, 73.21.La

The strong coupling regime in the interaction between a confined photon mode and electron-hole pairs in semiconductor nanodevices has been demonstrated recently [1]. The quasiparticles, so called polaritons [2,3], which are roughly half excitons and half photons, offer very interesting possibilities, such as, for example, a new lasing mechanism (polariton lasing) based on their quasibosonic nature [4], with pumping threshold (related to ground-state occupation) two orders of magnitude lower than ordinary (photon) lasing in the same devices [5], and operation at ambient temperatures [6].

In the present paper, we focus on the linear response of a model polariton system to terahertz radiation. The first motivation to carry on such a study is the intuitive idea that the interaction with the confined photon mode reinforces coherence of the excitonic subsystem and, thus, may reinforce the collective response of the excitons to the terahertz probe. This may result in a semiconductor version of the Giant Dipole Resonances (GDR), a phenomenon widely studied in nuclei [7] and electron clusters [8], with the possibility of controlling the position and intensity of the resonance by varying parameters such as the pumping rate or the photon-exciton detuning.

The second good reason to study terahertz absorption by excitonic polaritons is that it has proven to be very useful in order to observe exciton formation dynamics in quantum wells [9], and bulk systems [10]. In the polariton system, a few years ago the common belief was that a thermalized Bose-condensed state is reached [11,12]. Very recently, however, this conclusion along

with the interpretation of most experiments is being questioned [13]. We think, the available experimental techniques should be able to measure the degree of thermalization of the polariton system, not only under stationary conditions [11], but in the pumped regime as well [12]. Indicators following from interband emission alone are not enough because the main qualitative features (population of the lowest polariton state, behavior of the second order coherence function, etc) can be reproduced also from dynamical equations, without any thermalization mechanisms, both in the pumped [14] and in the stationary regimes [15].

Below, we compute terahertz absorption in two extreme situations. One is a Bose condensed state at very low temperatures, in such a way that only the many-particle ground state has a significant occupation probability. In our model, with not very realistic parameters, the $1s-2p$ excitonic transition is located at around $10 meV$, that is the temperature should be lower than $100 K$, a common experimental situation. The spectral function shows a GDR-like peak, whose position grows with the polariton number, Fig. 1 (a).

The second case corresponds to a polariton system in a non-equilibrium stationary state (result of a balance between pumping and losses), with occupation probabilities that can not be described by a Gibbs distribution. The terahertz spectral function gets a completely different shape, with a central peak at near zero energy which practically does not depend on the pumping rate, Fig. 1 (b).

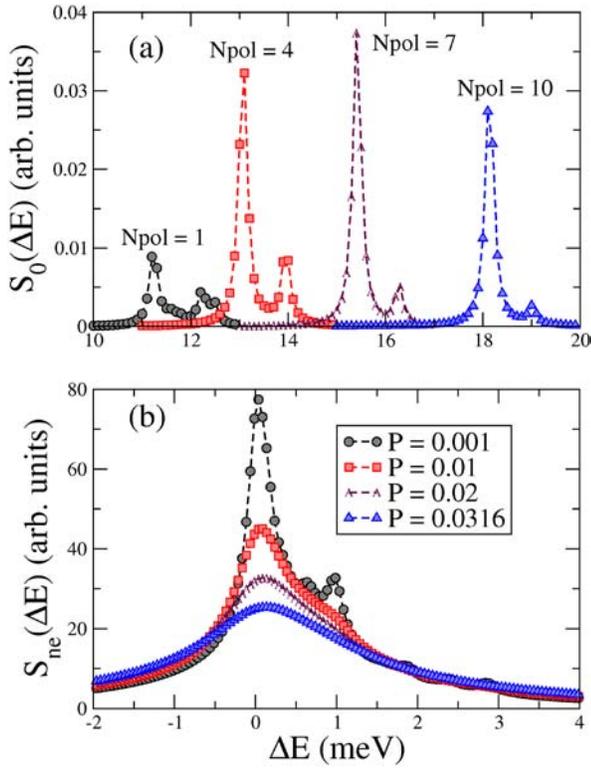


Figure 1. Comparison between the equilibrium and non-equilibrium terahertz absorption. (a) Ground-state spectral function, Eq. (1), for various N_{pol} numbers. At a given N_{pol} , the GDR is the highest peak. (b) Non-equilibrium spectral function, Eq. (12), for pumping rates (in ps) corresponding to mean polariton number in the interval (1,10). The detuning parameter is $\Delta = -3 meV$.

Intermediate, real experimental, situations would interpolate between the two extremes, and a measurement of the response in real systems would indicate their degree of thermalization.

Calculations are carried on in a model for the quantum dot-microcavity system, detailed described in Ref. [15], with very strong light-matter coupling constant ($3 meV$), which leads to a significant blueshift of the GDR resonance with respect to the $1s-2p$ like exciton transition. The main qualitative conclusions of the paper are expected to be valid also for any relatively large quantum dot or thin quantum well micropillar working under the strong coupling regime.

Ground-state response of non-interacting polaritons.

In order to get a preliminary estimate of the absorption spectrum, we first consider the ground-state response of non-interacting polaritons. We assume the system is in a Bose-condensed state, with N_{pol} polaritons occupying a single state. Intraband absorption is described by the dipole operator acting only on the exciton functions. The absorption probability is then proportional to $|\alpha d_{10}|^2 N_{pol}$ where α is the Hopfield coefficient [2] (that is, the weight of the exciton in the polariton function), and d_{10} is the intra-band dipole matrix element between ground-state exciton and an excited-state function. The latter is supposed to concentrate the oscillator strength for dipole transitions. Notice that the absorption probability increases with the number of polaritons in the ground state. The peak position, on the other hand, should be almost

constant, roughly equal to the energy difference between the exciton ground- and excited states.

Finite, but low, temperatures, should lead to similar results. In a grand canonical description, on the other hand, which is more natural for the polariton system, sectors with polariton number near the mean value will contribute also to the spectral function with relatively high weights. The effects of polariton-polariton interactions is considered in the next paragraph.

Ground-state response of interacting polaritons. Polariton-polariton interactions come from residual Coulomb interactions between excitons. Instead of using a phenomenological approach, we start from a model in which Coulomb interactions are treated exactly, and the fermionic degrees of freedom are explicit. There is a finite number (10) of single-particle states for electron and holes, and a single photon mode. Saturation effects due to Fermi statistics are seen when the polariton number is around (or greater than) 10. A detailed description can be found elsewhere [15].

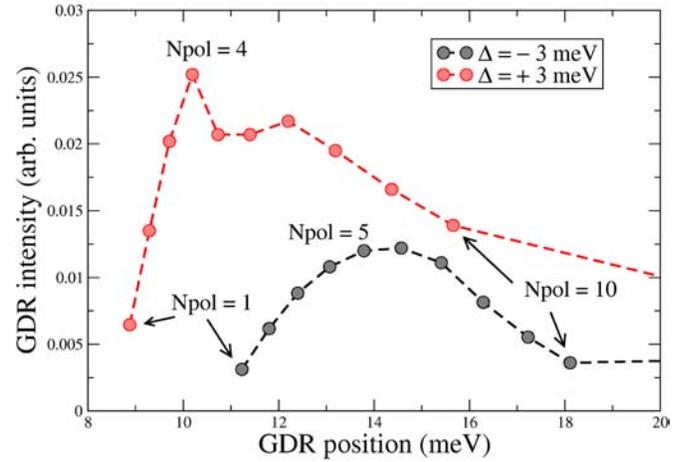


Figure 2. Intensity (that is, dipole matrix elements squared) and position of the GDR peak for two different values of the detuning, Δ . Each dot corresponds to a given N_{pol} .

The very-low temperature (ground-state) response of the N_{pol} -polariton system is contained in the spectral function

$$S_0(\omega) = \sum_I \frac{|\langle I | d | J \rangle|^2 \Gamma_0 / \pi}{\Gamma_0^2 + (\omega_{IJ} - \omega)^2}, \quad (1)$$

where matrix elements, $\langle I | d | J \rangle$, of the intraband dipole operator, $d \sim \sum_i (\vec{r}_i^{(h)} - \vec{r}_i^{(e)})$ (where $\vec{r}^{(h)}$ and $\vec{r}^{(e)}$ are, respectively, the hole and electron position vectors) shall be computed. $|J\rangle$ is the ground state function of the N_{pol} -polariton system, and $|I\rangle$ are excited states. $\Gamma_0 = 0.1 meV/\hbar$ is a phenomenological damping parameter, and $\omega_{IJ} = (E_I - E_J)/\hbar$ the transition frequencies.

In our model, wave functions are constructed as linear combinations

$$|P\rangle = \sum_{S_e, S_h, n} C_{S_e, S_h, n} |S_e, S_h, n\rangle, \quad (2)$$

where S_e and S_h are Slater determinants for electrons and holes, with electron and hole numbers N_e and N_h , respectively, and

n is the number of photons in the confined mode. Functions entering the combination preserve the polariton number

$$N_{pol} = N_e + n = N_h + n \quad (3)$$

and the total (envelope) angular momentum projection along the cavity axis (we assume a circular section)

$$L = \sum_i (l_i^{(e)} + l_i^{(h)}). \quad (4)$$

In Eq. (4), the index i labels the particles. $l_i^{(e)}$, for example, corresponds to the angular momentum projection along the cavity axis of the i -th electron. The ground-state function, $|J\rangle$, has $L = 0$, whereas $|I\rangle$ are $L = 1$ functions.

We show in Fig. 1 (a) the spectral function for different polariton numbers and detuning $\Delta = -3 \text{ meV}$. In the model, the parameter Δ measures the photon energy with respect to the nominal band gap, not the photon-exciton detuning. $\Delta = -3 \text{ meV}$ approximately corresponds to resonant conditions.

The GDRs can be identified as the dominant peaks in these curves. The peak position monotonously increases with increasing polariton number. This can be understood on intuitive grounds. The mass of the electron (or hole) cloud is $m \sim N_{pairs}$, and the Hooke coefficient for the force acting between clouds is $k \sim N_{pairs}^2$. Then, the excitation energy of the dipole mode is $\hbar\omega \sim \sqrt{k/m} \sim \sqrt{N_{pairs}} \sim \sqrt{N_{pol}}$. The maximum intensity, on the other hand, has a non-trivial dependence on N_{pol} : a kind of saturation effect is observed. The intensity first increases, as in the non-interacting case, but then, after reaching a maximum value, decays. These dependences are illustrated in Fig. 2, where the case $\Delta = +3 \text{ meV}$, corresponding to an enhanced excitonic component of polaritons, is also shown. In this positive detuning situation, the absorption probability rises because the Hopfield parameter α increases.

In spite of the fact that calculations are performed in a particular model, we expect that the statement about the existence of a peak in the absorption spectrum at relatively high excitation energies (of the order of the exciton $1s$ - $2p$ transition), whose intensity increases at least for polariton numbers well below saturation values, is general enough, and could be used as a criterium of a low-temperature system in equilibrium (Bose-condensed) state.

Dynamical response of the non-equilibrium system (with non-resonant pumping and photon losses). Below, we assume that relaxation mechanisms are not effective, and can not lead the polariton system to an equilibrium (thermal) state. The system is, thus, described by a density matrix, which is obtained from a master equation that takes care of photon losses through the cavity mirrors and incoherent (non-resonant) pumping. Details can be found in Ref. [15]. We solve the master equation in the stationary ($t \rightarrow \infty$) limit in order to obtain the quasiequilibrium distribution, $\rho^{(\infty)}$.

The response to the terahertz probe is computed in the

linear approximation, where the probe does not modify the quasiequilibrium distribution. We adopt a computational scheme similar to the one used for the photoluminescence response [15]. The starting point is the first-order correlation function

$$\langle d(t+\tau)d(t) \rangle = \sum_{I,J} \langle J|d|I \rangle g_{d,IJ}, \quad (5)$$

written in terms of the auxiliary function

$$g_{d,IJ}(t+\tau, t) = \langle (|J\rangle\langle I|)(t+\tau)d(t) \rangle, \quad (6)$$

where $|J\rangle$ are N_{pol} -polariton functions with total angular momentum $L = 0$, and the $|I\rangle$ are N_{pol} -polariton functions with $L = 1$. Because of the Quantum Regression Theorem [16], $g_{d,IJ}$ satisfies the same equation as the density matrix, that is [15]

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} g_{d,IJ} &= (i\omega_{IJ} - \Gamma_{IJ})g_{d,IJ} \\ &+ \kappa \sum_{K,M} \langle I|a|M \rangle g_{d,MK} \langle K|a|J \rangle \\ &- \frac{\kappa}{2} \sum_{K \neq I, M} \langle I|a|M \rangle \langle M|a|K \rangle g_{d,KJ} \\ &- \frac{\kappa}{2} \sum_{K, M \neq J} g_{d,IM} \langle M|a|K \rangle \langle K|a|J \rangle \end{aligned}, \quad (7)$$

with boundary conditions at $t \rightarrow \infty$, $\tau = 0$

$$\begin{aligned} g_{d,IJ} &= \sum_K \langle I|d|K \rangle \rho_{KJ}^{(\infty)} \\ &\approx \langle I|d|J \rangle \rho_{JJ}^{(\infty)}, \end{aligned} \quad (8)$$

where, in the last step, we used the fact that $\rho^{(\infty)}$ is approximately diagonal in the energy representation [14].

In Eq. (7), κ is the loss rate, 0.1 ps^{-1} in our model. The widths, Γ_{IJ} are computed from

$$\begin{aligned} \Gamma_{IJ} &= \frac{\kappa}{2} \sum_K \{ |\langle K|a|I \rangle|^2 + |\langle K|a|J \rangle|^2 \} \\ &+ \frac{P}{2} \{ N_{up}(I) + N_{up}(J) \} \end{aligned}, \quad (9)$$

where P is the pumping rate, and $N_{up}(I)$ is the number of states with polariton number $N_{pol}(I) + 1$ used to solve the equations.

The general solution of the linear system, Eq. (7), is written in terms of the eigenvalues, λ_n , and eigenvectors, $X_{IJ}^{(n)}$, of the matrix $B_{IJ, MK}$ defined by the r.h.s. of Eq. (7), that is

$$g_{d,IJ}(\tau) = \sum_n C_n \exp(\lambda_n \tau) X_{IJ}^{(n)}, \quad (10)$$

where the coefficients C_n are determined from the boundary conditions, Eq. (8).

The Fourier transform of Eq. (5) defines the response spectral function to the terahertz probe in the quasi-equilibrium system

$$S_{ne}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \sum_{I,J} \sum_n \frac{D_{IJ,n}^{(r)} \lambda_n^{(r)} + D_{IJ,n}^{(i)} (\lambda_n^{(i)} - \omega)}{(\lambda_n^{(r)})^2 + (\lambda_n^{(i)} - \omega)^2}, \quad (11)$$

where $D_{J,n} = \langle J | d | I \rangle C_n X_{JJ}^{(n)}$, and superscripts $(r), (i)$ refer to the real and imaginary parts of the magnitudes, respectively.

A simplified and more intuitive expression comes from the diagonal terms of Eq. (7) [15]. Notice that, for excitation energies $\hbar\omega > 1 \text{ meV}$, the diagonal is at least 10 times higher than the off-diagonal elements (because $\kappa = 0.1 \text{ ps}^{-1}$). Neglecting the off-diagonal terms, we get:

$$S_{ne}(\omega) \approx \frac{1}{\pi} \sum_{I,J} \frac{|\langle I | d | J \rangle|^2 \rho_{JJ}^{(\infty)} \Gamma_{JJ}}{\Gamma_{JJ}^2 + (\omega_{IJ} - \omega)^2}. \quad (12)$$

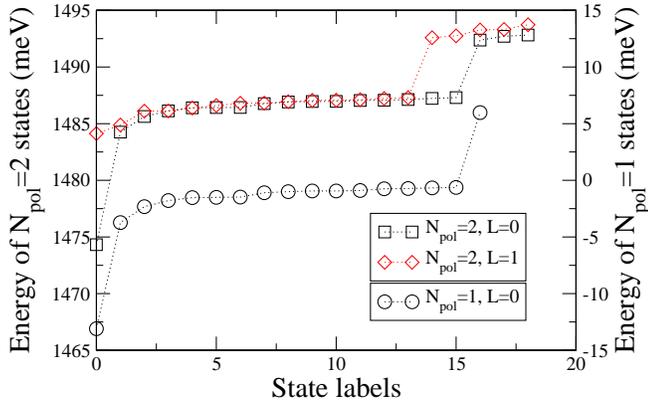


Figure 3. The lowest $N_{pol} = 2$ states with $L = 0$ and $L = 1$ in the model. A big number of near zero-energy dipole transitions are possible in the $N_{pol} = 2$ sector. We draw in the same figure, shifted by the nominal E_{gap}^* , the $N_{pol} = 1, L = 0$ states. Notice that $L = 0$ bands with different N_{pol} numbers are almost parallel.

As compared with S_{ν} , the non-equilibrium spectral function includes also contributions from the excited states, $|J\rangle$, which may have relatively high occupation probabilities, $\rho_{JJ}^{(\infty)}$, as can be seen, for example, in Fig. 6 of Ref. [15]. On the other hand, the dipole matrix elements for transitions originated in excited states could be much stronger than ground-state dipole elements. This statement follows from the energy-weighted sum rule for dipole transitions [17, 18]:

$$\sum_I \Delta E_{IJ} \langle \langle I | d | J \rangle \rangle^2 = C, \quad (13)$$

where constant C does not depend on the indices J .

The sum in Eq. (13) reduces to a single term when the oscillator strength from state $|J\rangle$ is concentrated on a single state, $|I\rangle$. Then, if there were excited states $|J\rangle$ for which the dominant transitions have $\Delta E_{IJ} \sim 0.1 \text{ meV}$, for example, their contribution to S_{ne} would be 100 times stronger than the ground state contribution. This is, indeed, what one sees in the spectral function, Fig. 1 (b). An extra factor of around 20 comes from the number of excited states. We have drawn in this picture the non-equilibrium spectral function for pumping rates, P , corresponding approximately to the same situations depicted in Fig. 1 (a). That is, the mean polariton number ($\langle N_{pol} \rangle = \sum_J \rho_{JJ}^{(\infty)} N_{pol}(J)$) for $P = 0.01 \text{ ps}^{-1}$, for example, is around 4, etc. In Fig. 3, we show that near zero-energy dipole transitions are very common in our model, and

should be very common also in micropillars with embebed quantum wells because of the exciton near flat band.

In conclusion, we expect the absorption spectral function for a non-equilibrium polariton system to be peaked at near zero energies, in clear contrast with the Bose-condensed system, whose spectral function is peaked at the GDR. The dependence on N_{pol} is also very different. In the thermalized system absorption increases with increasing polariton number, whereas in the nonequilibrium system it decreases as the pumping rate increases. Thus, terahertz absorption could be a sharp criterium allowing to discriminate between the thermalized and the non-equilibrium scenarios.

A. D. and A. G. acknowledge the Caribbean Network for Quantum Mechanics, Particles and Fields (ICTP) for support. The authors would like to thank Herbert Vinck-Posada and Alexey Kavokin for discussions and help.

-
- [1] C. Weisbuch, M. Nishioka, A. Ishikawa and Y. Arakawa, Phys. Rev. Lett. **69**, 3314 (1992); M. S. Skolnick, T. A. Fisher and D. N. Whittaker, Semicond. Sci. Technol. **13**, 645 (1998); J. P. Reithmaier, G. Seogonk, A. Löffler, C. Hofmann, S. Kuhn, S. Reitzenstein, L. V. Keldysh, V. D. Kulakovskii, T. L. Reinecke and A. Forchel, Nature (London) **432**, 197 (2004); T. Yoshie, A. Scherer, J. Hendrickson, G. Khitrova, H. M. Gibbs, G. Rupper, C. Ell, O. B. Shchekin and D. G. Deppe, Nature (London) **432**, 200 (2004).
 - [2] J. J. Hopfield, Phys. Rev. **112**, 1555 (1958); J. J. Hopfield and D. G. Thomas, Phys. Rev. **132**, 563 (1963).
 - [3] A. Kavokin and G. Malpuech, *Cavity polaritons* (Elsevier, Amsterdam, 2003); Y. Yamamoto, F. Tassone, and H. Cao, *Semiconductor Cavity Quantum Electrodynamics* (Springer, New York, 2000).
 - [4] A. Imamoglu, R. J. Ram, S. Pau and Y. Yamamoto, Phys. Rev. A **53**, 4250 (1996).
 - [5] D. Bajoni, P. Senellart, E. Wertz, I. Sagnes, A. Miard, A. Lemaître and J. Bloch, Phys. Rev. Lett. **100**, 047401 (2008).
 - [6] S. Christopoulos, G. Baldassarri Höger von Högersthal, A. J. D. Grundy, P. G. Lagoudakis, A. V. Kavokin, J. J. Baumberg, G. Christmann, R. Butté, E. Feltn, J.-F. Carlin and N. Grandjean,

Phys. Rev. Lett. **98**, 126405 (2007).

[7] See, for example, J. Speth (Ed.), *Electric and magnetic giant resonances in nuclei* (World Scientific, Singapore, 1991).

[8] See, for example, J.P. Connerade (Ed.), *Correlations in clusters and related systems* (World Scientific, Singapore, 1996).

[9] R. A. Kaindl, D. Hagele, M. A. Carnahan, and D. S. Chemla, Phys. Rev. B **79**, 045320 (2009).

[10] Takeshi Suzuki and Ryo Shimano, Phys. Rev. Lett. **103**, 057401 (2009).

[11] J. Kasprzak, M. Richard, S. Kundermann, A. Baas, P. Jeambrun, J. M. J. Keeling, F. M. Marchetti, M. H. Szymańska, R. André, J. L. Staehli, V. Savona, P. B. Littlewood, B. Deveaud and Le Si Dang, Nature (London) **443**, 409 (2006).

[12] H. Deng, D. Press, S. Götzinger, G. S. Solomon, R. Hey, K. H. Ploog, Y. Yamamoto, Rev. Lett. **97**, 146402 (2006).

[13] L. V. Butov and A.V. Kavokin, Nature Photonics **6**, 2 (2012).

[14] H. Vinck-Posada, B. A. Rodriguez, P. S. S. Guimaraes, A. Cabo and A. González, Phys. Rev. Lett. **98**, 167405 (2007).

[15] C. A. Vera, A. Cabo and A. González, Phys. Rev. Lett. **102**, 126404 (2009); C. A. Vera, H. Vinck-Posada, and A. González, Phys. Rev. B **80**, 125302 (2009).

[16] M. O. Scully and S. Subairy, *Quantum Optics* (Cambridge University Press, Cambridge, 2001).

[17] P. Ring and P. Schuck, *The nuclear many-body problem* (Springer Verlag, New York, 1980).

[18] A. González and A. Delgado, Physica E **8**, 342 (2000).

PROPIEDADES PIEZOELÉCTRICAS DE CERÁMICAS FERROELÉCTRICAS DE $\text{Pb}(\text{Zr},\text{Ti})\text{O}_3$ DOPADAS CON Sr Y Fe

PIEZOELECTRIC PROPERTIES OF FERROELECTRIC CERAMIC $\text{Pb}(\text{Zr},\text{Ti})\text{O}_3$ DOPED WITH Sr AND Fe

F. A. LONDOÑO^{a†}, D. J. LÓPEZ^b, M. H. LENTE^c, J. A. EIRAS^a Y D. GARCIA^a

a) Grupo de Cerâmicas Ferroelétricas, Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos, Brasil. flondono@df.ufscar.br[†]

b) Departamento de Química - Universidade Federal de São Carlos, São Carlos - SP, Brasil.

c) Instituto de Ciência e Tecnologia - Departamento de Ciência e Tecnologia, Universidade Federal de São Paulo. São Jose dos Campos - SP - Brasil. CEP: 12231-280

[†] autor para la correspondencia

(Recibido 23/2/2012; Aceptado 21/6/2012)

Los avances alcanzados en las últimas décadas en el desarrollo de sensores y actuadores, están de la mano con los progresos alcanzados en la ciencia de los materiales, particularmente, con los materiales ferroelétricos. Estos se destacan por tener elevadas constantes piezoeléctricas y factores de acoplamiento electro-mecánico. Por tanto, dominar los procesos de producción y realizar adecuadas investigaciones de las propiedades físicas de estos materiales es importante para el desarrollo tecnológico. Fueron investigadas las propiedades piezoeléctricas de cerámicas ferroelétricas de titanato circonato de plomo, a temperatura ambiente, en las fases monoclinica [$\text{Pb}(\text{Zr}_{0.52}, \text{Ti}_{0.48})\text{O}_3$] y tetragonal [$\text{Pb}(\text{Zr}_{0.50}, \text{Ti}_{0.50})\text{O}_3$], ambas dopadas con diferentes concentraciones de elementos iso-valentes (SrO) y hetero-valentes (Fe_2O_3). Una fuerte dependencia de las propiedades piezoeléctricas con la simetría y con la concentración relativa de dopantes fue observada. Los resultados son discutidos en términos de la formación de defectos, vía dopaje, y la interacción de ellos con los dominios ferroelétricos.

The progress made in recent decades in the development of sensors and actuators go hand in hand with advances in materials science, particularly with the ferroelectric materials. Those having large piezoelectric constants and large electromechanical coupling factors. Therefore, it is very important improve the production process and also to make investigations about appropriate physical properties of these materials for technological development. The piezoelectric properties of ferroelectric ceramics of lead zirconate titanate were investigated in room temperature, in the monoclinic phase [$\text{Pb}(\text{Zr}_{0.52}, \text{Ti}_{0.48})\text{O}_3$] and tetragonal phase [$\text{Pb}(\text{Zr}_{0.50}, \text{Ti}_{0.50})\text{O}_3$], and doped with different concentrations of iso-valent (SrO) and hetero-valent (Fe_2O_3) elements. A strong dependence of the piezoelectric properties with the symmetry and the relative concentration of dopants were observed. The results are discussed in terms of defect formation via doping, and the interaction of them with ferroelectric domains.

PACS: Piezoelectric materials 77.84.-s, PZT ceramics 77.84.Cg, Electromechanical effects 77.65.-j

I. INTRODUCCIÓN

Los materiales basados en titanato circonato de plomo, $\text{Pb}(\text{Zr}_x\text{Ti}^{1-x})\text{O}_3$ (PZT), en concentraciones próximas a la frontera morfotrópica de fases, normalmente presentan una alta respuesta electromecánica y/o piezoeléctrica, la cual hace al PZT adecuado para aplicaciones en sensores y actuadores [1,2,3]. El aumento de las propiedades piezoeléctricas en las proximidades de la frontera morfotrópica de fases se debe a un aumento en la facilidad de reorientación de los dominios durante la polarización causado por la proximidad de las estructuras ferroelétricas tetragonal y romboédrica, ya que es mayor el número de direcciones disponibles para la polarización [4]. Sin embargo, con el objetivo de mejorar la densificación y las propiedades dieléctricas y piezoeléctricas se ha investigado la adición de varios dopantes en el $\text{Pb}(\text{Zr},\text{Ti})\text{O}_3$ [5].

Las cerámicas de PZT pueden ser clasificadas dentro de dos

grupos: “hard” duras y “soft” blandas, dependiendo del tipo de dopantes usados. Las cerámicas de PZT duras pueden soportar altos niveles de excitación eléctrica, lo cual las hace adecuadas para ser usadas como transductores de alta potencia o alto voltaje, mientras las cerámicas blandas de PZT se caracterizan por tener alta permisividad lo cual las hace propicias para varios tipos de sensores, actuadores, etc [6]. El grupo formado por elementos que son incorporados con valencia mayor a la del catión substituido (por ejemplo, La^{+3}) en el lugar del Pb^{+2} , causa una disminución del campo coercitivo y de la conductividad eléctrica, un aumento en la polarización de saturación [7]. Además, promueven el movimiento de las paredes de dominio [8,9]. Estos elementos son clasificados como donadores (cerámicas blandas). Los elementos como Fe^{+3} y Na^{+1} con valencia menor son denominados aceptores (cerámicas duras). Al contrario de los donadores, aumentan el campo coercitivo, la conductividad eléctrica y disminuyen la polarización de saturación [7].

En los materiales ferroeléctricos el movimiento de las paredes de dominios es frecuentemente controlada por dopantes, en general se ha encontrado que la densidad de paredes de dominio, estructura de dominios, y su movilidad y el tamaño de los granos de la cerámica están interrelacionados y todos dependen de la concentración de dopantes [10,11].

El objetivo de este trabajo ha sido realizar la síntesis y caracterización de cerámicas piezoeléctricas del tipo "hard" dopadas con elementos iso- y hetero-valentes cerca de la frontera de fase morfológica, con el objetivo de optimizar las condiciones de sinterización y polarización en la determinación de las propiedades electromecánicas y dieléctricas como son el factor de acoplamiento electromecánico, la constante dieléctrica y las pérdidas dieléctricas.

II. MATERIALES Y MÉTODOS

Las cerámicas de PZT fueron preparadas por el método de reacción de estado sólido, a partir de polvos de alta pureza como PbO (Aldrich 99.9%), TiO₂ (Vetec 95%), ZrO₂ (Aldrich 99.9%), Fe₂O₃ (Aldrich 99.9%) y SrO (Aldrich 99.9%). La mezcla de los polvos fue realizada con el objetivo de formar las composiciones Pb(Zr_{0.50}Ti_{0.50})O₃ y Pb(Zr_{0.52}Ti_{0.48})O₃ dopando cada una de ellas con 1% Fe₂O₃ + 0,5% SrO y 0,02% Fe₂O₃ + 1% SrO respectivamente. Las denominaciones utilizadas en este trabajo para las diferentes cerámicas densificadas se encuentran en la tabla I. El polvo resultante se calcinó en aire a 850 °C durante 3,5 h. Para la conformación de las muestras, el polvo calcinado se mezcló con polivinil butiral (PVB) diluido previamente en acetona. Para garantizar la forma de discos, las muestras (polvo+ligando) fueron sometidas a prensado uniaxial a 4 MPa, durante 1 minuto. Después, las mismas se sometieron a prensado isostático en frío (aplicando 20 MPa, durante 15 minutos), lo que garantizó un cuerpo compacto homogéneo en verde. Posteriormente, el ligando fue retirado de las muestras tratándolas térmicamente a una temperatura de 500 °C por 4 horas, en un horno marca EDG, modelo 3000. Estas muestras fueron sinterizadas en aire a cuatro diferentes temperaturas, 1175 °C, 1200 °C, 1225 °C y 1250 °C por un tiempo de 3 h, con el objetivo de determinar a mejor condición de densificación. Para la sinterización, las muestras se colocaron en una base de alúmina y abajo de ellas se colocó polvo cerámico de la misma composición, para evitar que el Pb de las muestras se difundiera en la alúmina. Luego, la muestra y el polvo fueron tapados con un crisol el cual fue adherido a la base con una mezcla de PbZrO₃ con exceso de ZrO, garantizando así, una atmósfera rica en PbO con el objetivo de evitar excesivas pérdidas de plomo, que pueden alterar considerablemente la estequiometría en las cerámicas. La densidad de las muestras se midió utilizando el principio de Arquímedes, para lo cual se utilizó un sistema comercial marca Sartorius, modelo YDK 01-OD, acoplado a una balanza Sartorius, modelo BP 210D. Las muestras cerámicas también se caracterizaron por microscopía electrónica de barrido, para analizar forma y tamaño medio de los granos. Las cerámicas con mejores condiciones de sinterización fueron

caracterizadas eléctricamente. La caracterización eléctrica se realizó sobre los discos pulidos, hasta alcanzar el plano-parallelismo y electrodados con pasta de plata. Los electrodos se sinterizaron a 600 °C durante 30 minutos. Los procesos de polarización se realizaron a campos eléctricos de 30 kV/cm, 38 kV/cm y 45 kV/cm, a temperaturas de 80 °C y 120 °C durante 30 minutos. La determinación de las propiedades dieléctricas se realizó mediante un analizador de impedancias HP4192A. Las propiedades piezoeléctricas se evaluaron de acuerdo con las normas IEEE [12], empleando el método de resonancia-anti-resonancia. La ecuación (1) fue usada para calcular el coeficiente de acoplamiento piezoeléctrico plano (k_p):

$$\frac{k_p^2}{1-k_p^2} = 2.51x \left[\frac{f_a - f_r}{f_r} \right] \quad (1)$$

donde, f_r es la frecuencia de resonancia y f_a es la frecuencia de anti-resonancia.

Cerámica sinterizada	Denominación
PZT (50/50) + 1%Fe-0,5%Sr	50PZT5Sr
PZT (50/50) + 0,02%Fe-1%Sr	50PZT1Sr
PZT (52/48) + 1%Fe-0,5%Sr	48PZT5Sr
PZT (52/48) + 0,02%Fe-1%Sr	48PZT1Sr

III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En la figura 1 se puede observar el comportamiento de la densidad relativa en función de la temperatura para las diferentes cerámicas de PZT sinterizadas en este trabajo. Claramente se observa que a densidad sigue la misma tendencia para las 4 cerámicas. La densidad aumenta pasando por un máximo en 1200 °C. Comparando con los datos reportados en la literatura, dicha temperatura es igual a la reportada por Rai et al [13] en la obtención de cerámicas de PZT dopadas con Fe³⁺ y La³⁺.

Los valores de densidad a partir de 1200 °C disminuyen posiblemente por causa la volatilización de PbO. A bajas temperaturas la entrada de Fe³⁺ y Sr²⁺ ocasiona extracción de PbO en la matriz de PZT (generación de vacantes de Pb⁺² y Pb⁺²/O⁻² respectivamente). Sin embargo, a altas temperaturas la descomposición del material es la causa principal de las pérdidas de peso que puede ocasionar la descomposición del PZT que genera heterogeneidades en la microestructura y por tanto una disminución de la densidad del material y de sus propiedades dieléctricas y piezoeléctricas [4,14]. Es posible también observar que las cerámicas dopadas con mayor cantidad de Fe³⁺ presentan, en general, mayores densidades que las cerámicas de PZT dopadas con Sr²⁺. Esto puede ser un indicio de que mayores cantidades de Sr²⁺ favorecen la presencia de porosidad y/o la salida de plomo. La sinterización a 1200 °C (menor que a reportada en presencia de buffer [15]) puede indicar que la mayor actividad del PbO en el material sinterizado sin buffer acelera su densificación, hecho que

puede ser atribuido a los dopantes incorporados en el PTZ. Banerjee *et al.* [16] estudiaron la influencia de varios dopantes, entre los que se encuentran SrO, en el PZT. En ese trabajo se observó que la adición de SrO, tuvo un mínimo efecto en el comportamiento de la densidad, encontrándose valores entre 93% y 95% de densidad relativa cuando es adicionado entre 1% - 4% en peso. Por otro lado, cuando se dopa PZT con Fe_2O_3 , Raman y López observaron un aumento de la densidad con el aumento de la concentración de Fe^{3+} [17].

A partir de aquí, fueron seleccionadas las cerámicas con mayor densidad para continuar con las caracterizaciones realizadas en este trabajo.

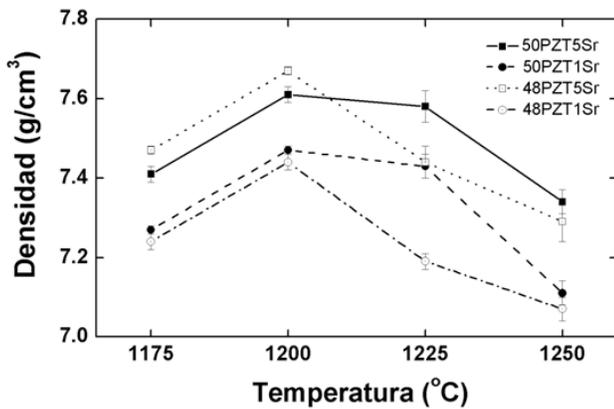


Figura 1. Comportamiento de la densidad relativa en función de la temperatura de sinterización, para las cerámicas de PZT obtenidas en este trabajo.

En la figura 2 se puede observar representativamente la microscopía electrónica de barrido de la cerámica 50PZT5Sr, obtenida a partir del ataque térmico de la superficie previamente pulida. En general todas las cerámicas presentaron granos con tendencia redonda, con cierto nivel de porosidad y bordes de grano finos. Una característica importante presente en todas las cerámicas fue el crecimiento no homogéneo de los granos, ocasionando una gran dispersión en el cálculo de los valores de tamaño medio de grano, siendo por tanto, descartado el comportamiento de ese parámetro en función de los dopantes para el presente estudio.

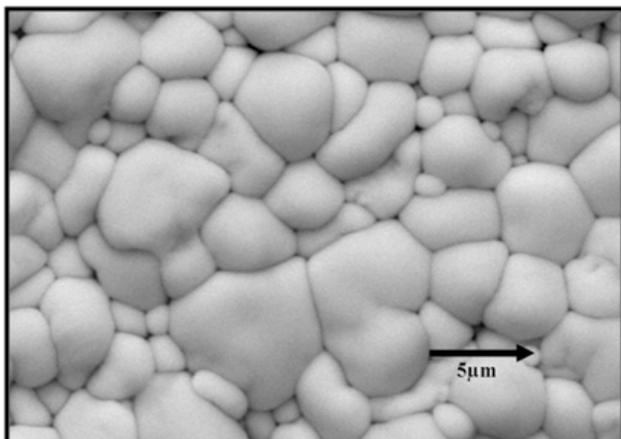


Figura 2. Microscopía electrónica de barrido de la cerámica 50PZT5Sr.

Los valores de k_p en función del campo eléctrico y temperatura de polarización para las cerámicas descritas en la tabla I están representados en la figura 3. Se puede observar que el aumento del campo eléctrico y de la temperatura de polarización aumentó el valor de k_p . Resultado esperado debido a que el aumento de campo eléctrico de polarización permite que mayor número de paredes de dominios se orienten en la dirección del campo aplicado, obteniéndose así, un aumento del k_p [18,19].

En lo que se refiere a las cerámicas dopadas con mayor cantidad de Sr^{2+} , existe una quiebra dieléctrica cuando las cerámicas son polarizadas a 120 °C y 45 kV/cm. Esto indica que la mayor cantidad de Sr^{2+} (menor de Fe^{3+}) disminuye la resistencia eléctrica de las cerámicas, llevándolas a la quiebra dieléctrica [6]. La adición de Fe^{3+} , sustituyendo al Ti^{4+} o al Zr^{4+} brinda un efecto “endurecedor” al PZT, proporcionando a las cerámicas dopadas con mayor cantidad de Fe^{3+} , mayor resistencia mecánica, evitando así, la quiebra dieléctrica cuando sometidas a altos campos y altas temperaturas de polarización. Se puede inferir también que no existe una relación directa ni indirecta entre la densidad de las cerámicas y los valores de k_p .

Comparando los valores de k_p con los reportados en la literatura para la cerámica PZT(52/48), $k_p = 47\%$ [20], se observa que los valores alcanzados en este trabajo son mayores. En el caso de la cerámica PZT(50/50) cuando se dopa con Sr^{2+} el valor de k_p es menor que cuando es dopada con Fe^{3+} (44% y 59% respectivamente) [5,21].

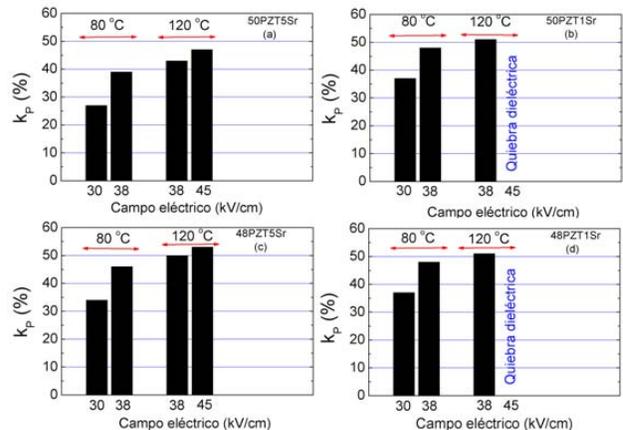


Figura 3. Comportamiento del coeficiente de acoplamiento piezoeléctrico (k_p (%)) en función del campo eléctrico y de la temperatura de polarización de las cerámicas densificadas en este trabajo.

Se observa en la figura 4 el comportamiento de la constante dieléctrica en función del campo eléctrico y temperatura de polarización para las cerámicas 50PZT5Sr, 50PZT1Sr, 48PZT5Sr y 48PZT1Sr. Existe una tendencia de aumento de constante dieléctrica (K) con el aumento de temperatura y campo eléctrico de polarización. K aumenta con el incremento de la temperatura debido a la polarización interfacial llegando a ser más dominante que la polarización dipolar [13]. En lo concerniente al tipo de dopantes usados, es visible valores mayores de constante dieléctrica para las cerámicas dopadas con mayor cantidad de Sr^{2+} , resultado que es atribuido principalmente a fluctuaciones estructurales en el sitio A de

la estructura cristalina, los cuales son ocupados por Pb^{+2} y Sr^{+2} . Estudios de difracción de Rayos X, revelaron que dopar con Sr^{+2} en el sitio A en composiciones cercanas a la frontera morfotrópica de fases del PZT resulta en la intensificación de la tetragonalidad, por causa de la sustitución de átomos de Pb^{+2} (1,44 Å) que tienen menor radio que los de Sr^{+2} (1,49 Å) [22]. Sumado a lo anterior, la adición de pequeñas cantidades de Fe^{+3} en el sitio B genera vacancias de oxígeno [4] que aumentan la temperatura de Curie y el momento de dipolo de la red y por tanto, incrementa el valor de la constante dieléctrica [13]. Los valores de la constante dieléctrica obtenidos en la figura 4, son relativamente mayores a los reportados en la literatura para cerámicas de PZT y PZT dopadas con Sr^{+2} y Fe^{+3} [20,21].

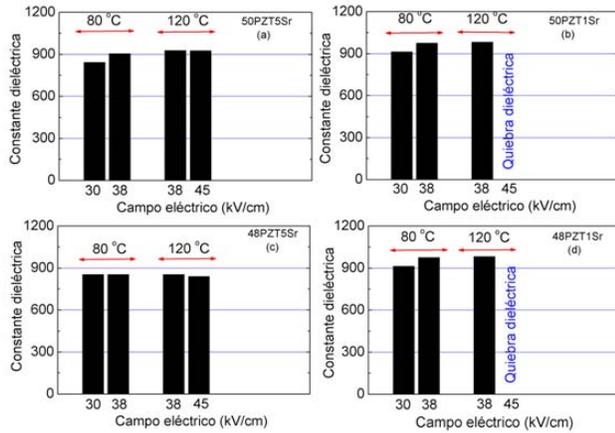


Figura 4. Comportamiento de la constante eléctrica (K) en función del campo eléctrico y de la temperatura de polarización de las cerámicas densificadas en este trabajo

Las pérdidas dieléctricas en función del campo eléctrico y temperatura de polarización pueden ser vistas en la figura 5. Una característica en común para todas las cerámicas son los bajos valores de pérdidas dieléctricas que abren la posibilidad de usar dichas cerámicas como transductores, especialmente para aquellas polarizadas a 120 °C y 38 kV/cm.

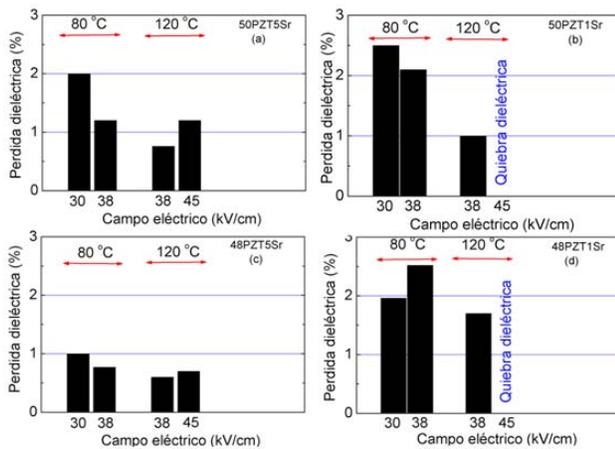


Figura 5. Comportamiento de las pérdidas dieléctricas en función del campo eléctrico y de la temperatura de polarización de las cerámicas densificadas en este trabajo

En la figura 6 se observa el comportamiento del factor de calidad mecánico en función de las condiciones de polarización de las cerámicas densificadas en este trabajo. Se puede ver mayores valores de Q_m para las cerámicas densificadas con mayor

cantidad de Fe^{+3} , resultado a ser esperado por causa del efecto “endurecedor” propiciado por las mayores cantidades de Fe^{+3} que dificulta el movimiento de las paredes de dominio [23].

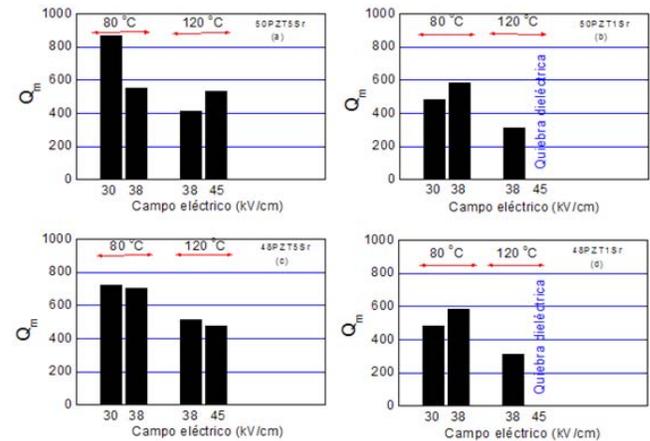


Figura 6. Comportamiento del factor de calidad mecánico (Q_m) en función del campo eléctrico y de la temperatura de polarización de las cerámicas densificadas en este trabajo

IV. CONCLUSIONES

Las mejores condiciones de polarización dependen del tipo y concentración de los dopantes. Las cerámicas 50PZT5Sr y 48PZT5Sr, dopadas con mayor cantidad de Fe^{+3} , tienen como mejor condición de polarización 45 kV/cm a 120 °C por 30 min. En el caso de las cerámicas 50PZT1Sr y 48PZT1Sr, dopadas con mayor cantidad de Sr^{+2} , tienen como mejor condición de polarización 38 kV/cm a 120 °C por 30 min.

Altos valores de acoplamiento electromecánico hacen a estas cerámicas apropiadas para la construcción de transformadores piezoeléctricos, actuadores y transductores de alta potencia y alto voltaje, especialmente las dopadas con mayor cantidad de Fe^{+3} (50PZT5Sr y 48PZT5Sr).

En las cerámicas del sistema PZT estudiadas en este trabajo, la adición de mayores cantidades de Fe^{+3} propicio una menor movilidad de dominios originando un efecto “endurecedor” que fue observado por valores levemente menores de constante dieléctrica y mayores valores de factores de calidad mecánicos, siendo que el proceso de reorientación de dominios fue altamente dependiente de la presencia de impurezas.

La introducción de mayores cantidades de Sr^{+2} en el PZT, incremento la constante dieléctrica en los sistemas cerámicos a base de PZT analizados en este trabajo, por causa de la ocupación de Sr^{+2} en los sitios del Pb^{+2} en la estructura perovskita, hecho que aumento el factor de tetragonalidad y por tanto, las propiedades dieléctricas de las cerámicas.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido posible gracias al apoyo económico e institucional de las agencias brasileras CAPES, FAPESP, CNPq y de la fundación venezolana FUNDAYACUCHO.

-
- [1] B. Jaffe, W. R. Cook y H. Jaffe, *Piezoelectric Ceramics*, (London: Academic Press, 1971), pp. 5-10.
- [2] S. E. Park, y T. R. Shrout, *J. Appl. Phys.* **82**, 1804 (1997).
- [3] G. H. Haertling, *J. Am. Ceram. Soc.* **82**, 797 (1999).
- [4] T. Jardiel, y col., *Bol. Soc. Esp. Ceram.* **41**, 10 (2002).
- [5] F. Kulcsar, *J. Am. Ceram. Soc.* **42**, 343 (1959).
- [6] N. Duan, y col., *Appl. Phys. Lett.* **71**, 1786 (1997).
- [7] L. Wu, y col., *J. Phys. C: Solid State Phys.* **16**, 2803 (1983).
- [8] C. Tanasoiu, E. Dimitriu, y C. Miclea, *J. Eur. Ceram. Soc.* **19**, 1187 (1999).
- [9] H. Zheng, y col., *J. Eur. Ceram. Soc.* **21**, 1371 (2001).
- [10] L. Jin, Z. He, y D. Damja, *Appl. Phys. Lett.* **95**, 1 (2009).
- [11] X. L. Zhang, y col., *J. Mater. Sci.* **18**, 968 (1983).
- [12] T. I. O. E. A. E. Engineers, *Piezoelectric IEEE Standards on Piezoelectricity, ANSI/IEEE Std. 176*, (New York, USA, 1987).
- [13] R. Rai, y col., *Phys. B. Condens. Matter.* **382**, 252, (2006).
- [14] K. H. Hardtl, y H. Rau, *Solid State. Commun.* **7**, 41 (1969).
- [15] L. A. Celi, y col., *Bol. Soc. Esp. Ceram.* **38**, 493 (1997).
- [16] A. Banerjee, A. Bandyopadhyay, y S. Bose, *J. Am. Ceram. Soc.* **89**, 1594 (2006).
- [17] K. Ramam, y M. Lopez, *Phys. Status Solidi A* **203**, 3852 (2006).
- [18] S. Ikegami, I. Ueda, y T. Nagata, *J. Acoust. Soc. Am.* **50**, 1060 (1971).
- [19] I. Ueda, *Japan J. of Appl. Phys.* **11**, 450 (1972).
- [20] F. Kulcsar, *J. Am. Ceram. Soc.* **42**, 49 (1959).
- [21] T. B. Weston, V. M. Webster, y V. M. Mcnamara, *J. Am. Ceram. Soc.* **52**, 253 (1969).
- [22] R. Koduri y L. Salinas, *Phys. Status Solidi A* **203**, 2119 (2006).
- [23] T. Tadayuki, *Ferroelectrics.* **41**, 143 (1982).
-

LA CULTURA CIENTÍFICA Y LA DESFACTUALIZACIÓN DE LA ENSEÑANZA DE LA FÍSICA

THE SCIENTIFIC CULTURE AND THE DEFACTUALISATION OF PHYSICS TEACHING

F. A. HORTA RANGEL^{a,†} Y A. GONZÁLEZ ARIAS^{a,b,†}

a) Dpto. Ingeniería Civil y Ambiental, Universidad de Guanajuato; Lascrain de Retana 5, CP 36000, México. anthort@hotmail.com[‡]

b) Facultad de Física, Universidad de la Habana. CP 10400, La Habana, Cuba. arnaldo@fisica.uh.cu[‡]

[†] autor para la correspondencia.

(Recibido 4/6/2012; Aceptado 2/8/2012)

Existe una diferencia esencial entre las ciencias formales y las factuales, por lo que los métodos de investigación de las primeras no son siempre aplicables a las segundas. Los enunciados formales consisten en relaciones entre signos; los de las ciencias factuales se refieren a eventos o procesos reales. De aquí que mientras a las ciencias formales les basta la lógica para demostrar sus proposiciones con rigor, las factuales necesitan además de la observación y el experimento. Junto a las ciencias coexisten las pseudociencias; todo campo de conocimiento que no es científico, pero se publicita como tal, es pseudocientífico. Una parte importante de la cultura científica y su divulgación es la de hacer énfasis en las diferencias entre ciencias y pseudociencias. La aplicación indiscriminada a las ciencias factuales de los métodos formales puede conducir a la pseudociencia. Aquí se presentan algunos ejemplos de cómo se puede afectar notablemente la enseñanza de la física en los niveles básicos –e incluso en algunas especialidades universitarias– al dar prioridad a lo formal en perjuicio de lo factual. También se analizan algunas proposiciones pedagógicas que no cumplen de forma adecuada los requerimientos esenciales de las ciencias factuales.

There is an essential difference between formal and factual sciences; as a result, research methods from the first ones do not always apply to the second ones. Formal proposals consist in relations between signs; those of factual sciences are referred to real processes or events. Hence, while in formal sciences the logic is enough to prove their propositions with all strictness; factual sciences need in addition observation and experiment. Together with sciences, pseudosciences coexist; any field of knowledge not being scientific, but proclaiming itself as so, is pseudoscientific. An important part of the scientific culture and its spreading is to emphasize the differences between sciences and pseudosciences. The misinterpretation of formal methods when applied to factual sciences may easily lead to pseudoscience. Here we present some examples of how physics teaching can be notably affected in the basic levels –and even in some university careers–, when giving priority to the formal features in detriment of the factual ones. In addition, we analyze some pedagogic proposals which do not suitably fulfill basic scientific requirements.

PACS: Teaching methods and strategies, 01.40.gb; Education, 01.40.-d; Computer use in laboratory, 01.50.Lc

LA CULTURA CIENTÍFICA

El tema de la cultura científica ha sido de interés creciente en los últimos años. La divulgación científica –y por ende, la promoción de la cultura científica– persigue fomentar un mayor conocimiento de nosotros mismos y del mundo que nos rodea, con el fin de:

- Crear mejores condiciones de vida en lo individual,
- Promover la toma de conciencia y la participación ciudadana en los problemas que afectan a la comunidad y a la sociedad,
- Facilitar la toma de decisiones de todo tipo, a cualquier nivel, sobre la base de criterios sólidos, e
- Instruir a todos en cómo diferenciar la ciencia de las pseudociencias y pseudotecnologías, con el fin de evitar posibles daños a la economía y a las personas.

Una mayor cultura científica también requiere de un mayor conocimiento de los profesionales sobre el lugar que ocupa cada ciencia particular en el panorama científico universal, así como su interrelación con las restantes ciencias. Éstos y otros aspectos generales de la cultura científica han sido analizados previamente en otro lugar [1].

En lo que sigue se aplican algunos de los criterios allí expuestos al tema de la enseñanza de la física, cuestión muy controvertida en la actualidad, tanto en los llamados ‘países desarrollados’ como en los que se encuentran en vías de desarrollo. Con este fin se presentan ejemplos de cómo se puede afectar negativamente la enseñanza de la física en los niveles básicos –e incluso en algunas especialidades universitarias– al dar prioridad a lo formal en perjuicio de lo factual. También se analizan algunas proposiciones pedagógicas que no cumplen de forma adecuada los requerimientos esenciales de las ciencias factuales.

La física es una ciencia factual. A diferencia de las ciencias formales como las matemáticas y la lógica, se basa en hechos. Los postulados de las ciencias formales son racionales y verificables, pero no son objetivos; por sí solas estas ciencias no son capaces de proporcionar información sobre la realidad, aunque es usual que construyan sus propios objetos de estudio haciendo abstracción de los objetos reales, tanto naturales como sociales. No obstante, su 'materia prima' fundamental no es lo material, sino lo ideal. Tenemos así una primera gran división de las ciencias: formales (basadas en ideas) y factuales (basadas en objetos materiales) que, pese a ser diferentes, persiguen un objetivo común: encontrar las leyes que rigen los sucesos estudiados, tengan o no representación material.

Cualquier ciencia se dedica a buscar las relaciones forzosas de causa y efecto entre diferentes acontecimientos; esa es su misión principal. Develar las leyes que rigen la interacción entre sucesos ideales o materiales es justamente lo que permite encontrar relaciones adicionales entre ellos –o con otros sucesos– aún no descubiertas. También posibilita el hacer predicciones válidas para el comportamiento futuro, posiblemente la característica más importante del conocimiento científico: si tal cosa sucede, invariablemente tal otra tendrá (o no tendrá) lugar.

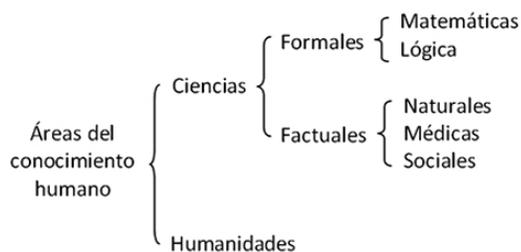


Figura 1. Áreas del conocimiento humano

Los enunciados formales consisten en relaciones entre signos, los de las ciencias factuales se refieren a sucesos y procesos. De aquí que mientras a las ciencias formales les basta la lógica para demostrar sus teoremas con toda rigurosidad, las factuales necesitan adicionalmente de la observación y el experimento para confirmar sus conjeturas [2]. A su vez, las ciencias factuales se dividen en naturales, sociales y médicas, según se refieran a eventos donde intervienen o no las personas o la salud de éstas. Las humanidades no son ciencias; se dedican a recopilar información sin pretender encontrar leyes o relaciones de causa-efecto entre los eventos, sucesos o procesos que estudian (figura 1).

Junto a las ciencias coexisten las pseudociencias. Todo campo de conocimiento que no es científico, pero se publicita como tal, es pseudocientífico. Una parte importante de la cultura científica y su divulgación es la de hacer énfasis en el método científico y en las características principales que diferencian a las ciencias de las pseudociencias [3,4,5]. Un breve resumen del método científico se puede consultar en [1].

De las asignaturas de física que se imparten en cualquier carrera de ciencias o ingeniería, la mecánica es sin duda la más importante [6]. En ella se introducen conceptos básicos que serán utilizados en otras asignaturas como la termodinámica o el electromagnetismo, amén de materias específicas de otras especialidades como la química, la biología y todas las ingenierías. Ejemplos sobran: los conceptos de velocidad o energía son muy afines a la química, la cinética y los enlaces químicos; la biología moderna requiere la medición precisa de diversas magnitudes que se introducen por primera vez en la física.

Es en los cursos de Mecánica donde se introducen las magnitudes fundamentales y los conceptos de medición e incertidumbre, que serán aplicados posteriormente en todas las carreras técnicas y de ciencias naturales, y también en las ciencias médicas.

La experiencia personal de los autores al impartir diversos programas de física general en diferentes carreras de ciencias e ingeniería, junto al intercambio o colaboración con profesores de otros niveles de educación, les ha posibilitado constatar lo siguiente. El desarrollo de la informática ha llevado a algunos a pensar que es posible sustituir el experimento y las mediciones con programas informáticos que los representen, obviando la realidad de que regular o ajustar un instrumento para hacer una medición y determinar su incertidumbre no tiene nada que ver con apretar una tecla en un ordenador. El sentido del tacto, el uso de las manos, la interacción de los músculos y la visión tridimensional del instrumental proporcionan una vía de aprendizaje muy disímil al de la simple visión. El mensaje llega al cerebro de forma muy diferente y las experiencias acumuladas también lo serán; no hace falta ser psicólogo para comprenderlo. La idea no es negar la utilidad de la informática como apoyo en el aprendizaje; es que resulta muy claro que apretar teclas y mirar dibujos o animaciones no puede sustituir a la experiencia que se obtiene del proceso de ensayo y error asociado al experimento y a la manipulación de los instrumentos y objetos reales. Son dos procedimientos totalmente diferentes, que sirven para entrenar habilidades también diferentes.

Otras veces se hace énfasis en las deducciones lógicas propias de las ciencias formales, prestando muy poca o ninguna atención al experimento y los aspectos factuales. Además de soslayarse por completo el carácter primordial de las mediciones, no se hace distinción entre mediciones directas e indirectas, no se menciona el criterio operacional para la definición de las magnitudes físicas fundamentales, o se altera el orden lógico que comienza en las mediciones intuitivas más simples y directas hacia las más complejas e indirectas. Tal proceder dificulta enormemente la asimilación de los cursos por parte del estudiante, pues se le transmite una visión deformada de la realidad y de la ciencia, que sólo será corregida posteriormente en aquellos estudiantes que logren pasar a la universidad a

estudiar alguna ciencia natural –y no siempre–.

El simple hecho de medir una longitud con una regla y el tiempo con un reloj proporciona al estudiante promedio una gran cantidad de nuevas ideas, interpretaciones e inquietudes legítimas traducidas en preguntas –a veces muy simples y aparentemente tontas para algunos– como cualquier profesor con experiencia ha podido comprobar alguna vez.

Existen cursos de Mecánica para ingenieros cuyo programa, con un enfoque eminentemente matemático, omite por completo el fundamento experimental y el proceso de inducción que acompaña a la leyes físicas (e incluso a veces el enunciado correcto de las propias leyes). Tales cursos hacen énfasis en la resolución de problemas, reduciendo las leyes a su mera expresión matemática, con muy poca o ninguna justificación del origen de su existencia y una muy pobre interpretación de lo que representan como descripción de la realidad. A esto se suma que el trabajo de laboratorio es prácticamente inexistente.

Al carecer de fundamento teórico y experimental, el curso de física básica se transforma en un curso de memorización de fórmulas y ejercicios matemáticos que en nada representan lo que en realidad se debería perseguir con esta disciplina. (Aunque después aparezca en el currículo que el estudiante aprobó un curso de física básica de tantas horas y el propio estudiante piense que ha aprendido Física y que está capacitado para opinar sobre ella).

MEDICIONES DIRECTAS E INDIRECTAS

Como su nombre lo indica, en una *medición directa* el valor de la magnitud se obtiene directamente mediante algún instrumento (i.e., una longitud con una regla, el tiempo con un reloj o la temperatura con un termómetro). La *medición indirecta* proporciona valores a partir de alguna expresión analítica como, por ejemplo, la energía cinética $E_c = \frac{1}{2}mv^2$, cuyo valor se puede obtener sólo a partir de la medición directa de la masa (por ej., con una balanza) y la indirecta de la velocidad (longitud/tiempo), o a través de una igualdad con alguna otra expresión analítica.

Es por esto que los cursos tradicionales de mecánica comienzan por introducir los conceptos de longitud, tiempo, masa o fuerza (medida con un dinamómetro) y la determinación de esas magnitudes a partir de algún experimento sencillo, para que el estudiante aprenda primeramente el uso de los correspondientes instrumentos y el significado de la incertidumbre de la medición. Se establece así, de una manera lógica, el vínculo indispensable entre la teoría y la práctica, comenzando por lo más simple hasta llegar a lo más complejo.

Sin embargo, también es posible encontrar cursos de Física desligados totalmente del enfoque factual, en ocasiones motivados por el deseo de que los estudiantes aprendan física en un período de tiempo demasiado breve. Se toman en cuenta muchos criterios supuestamente ‘pedagógicos’, pero la variable

tiempo se soslaya, o simplemente se considera el tiempo que el profesor necesita para impartir un tema (bien, regular o mal) y no el que tarda el estudiante en asimilarlo.

Es obvio que los estudiantes no podrán aprender física si no se le dedica el tiempo suficiente a esas asignaturas. Si la escasez de tiempo va unida a la desfactualización, el resultado es sin dudas previsible y aciago. Puede que ésta sea una de las causas principales del rechazo que muestran muchos estudiantes a las asignaturas de física en la enseñanza media y universitaria, a pesar de sentir atracción por otras ciencias.

Otras veces se propone comenzar el estudio de la Mecánica por el concepto de energía, o la Termodinámica por el aún más complejo concepto de entropía, lo que aparte de los deseos del autor de presentar un enfoque didáctico “novedoso” –o quizás presionado por el escaso tiempo de que dispone– no parece aportar ventaja alguna para el estudiante, sino mas bien dificultades adicionales [7,8,9].

Energía	Expresión Analítica	Magnitudes a medir (directa o indirectamente)
Cinética	$\frac{1}{2}mv^2$	Masa (m) Velocidad (v)
Potencial gravitacional	$G \frac{m_1 m_2}{r}$	Masa (m) Longitud (r)
Potencial electrostática	$k \frac{q_1 q_2}{r}$	Carga (q) Longitud (r)
Del campo eléctrico (por u. de volumen)	$\frac{1}{2} \epsilon E^2$	Permitividad (ϵ) Intensidad de campo (E)
Del campo magnético (por u. de volumen)	$\frac{1}{2} \mu H^2$	Permeabilidad (μ) Intensidad de campo (H)
Energía en reposo (E_0)	mc^2	Masa (m), Velocidad de la luz (c)
Niveles energéticos (ΔE) a partir de la energía del fotón	$h\nu$	Frecuencia (ν)

EL ENFOQUE ENERGÉTICO DE LA MECÁNICA

La energía no es algo que se pueda definir en pocas palabras y es común que el concepto aparezca indefinido en muchos textos de física, o definido de forma deficiente. Unas veces se confunde el significado popular con el significado más preciso de la física. En otras no se hace distinción entre un nombre como ‘energía solar’ –que sólo posee valor nominal, sin valores numéricos ni expresión analítica asociada– y una energía física real asociada a una expresión analítica. Y otras más se echa mano a la filosofía –que la mayoría de los propios filósofos no consideran una ciencia– para tratar de definir algo que, por ser una magnitud, debe ser necesariamente expresado en números.

De aquí que, para definir correctamente la energía, tanto el concepto popular como el nominal o el filosófico resultan

insuficientes. Una discusión detallada del tema, que incluye una propuesta de definición que obvia estos inconvenientes, se ha publicado en otro lugar [3,10].

No existen instrumentos para medir energías; siempre se miden indirectamente; algunos ejemplos se muestran en la Tabla I. Notar que cada energía, asociada a un ‘apellido’ específico, tiene su expresión analítica propia que permite determinar su valor numérico. (La energía de enlace químico no tiene una expresión analítica única, pero sí posee valores numéricos obtenidos del experimento en cada caso).

Muchos valores de la energía cuantizada en el micromundo se obtienen a partir de la expresión $\Delta E = h\nu$, donde lo que se mide realmente es la frecuencia de la radiación que interacciona (o su longitud de onda), con unidades del inverso del tiempo.

A partir de lo anterior, parece bastante obvio que resultará muy confuso para el estudiante que se trate de introducir el concepto de energía sin presentar y explicar previamente los parámetros necesarios para medirla. Tal forma de presentar el curso deja al alumno a merced de lo que le exponga el profesor, coarta su iniciativa y le resta posibilidades de indagar e investigar por sus propios medios. El estudiante no será capaz de relacionar de manera significativa los nuevos conocimientos a los anteriores, ya que no se le han traspasado previamente. En consecuencia, será incapaz de asociar el concepto –para él novedoso– con la realidad que pretende describir. El aprendizaje resultará, a todo lo más, mecánico y no significativo [11].

Ausubel–, uno de los fundadores de las modernas teorías constructivistas y creador de la Teoría del Aprendizaje Significativo, ha expresado: “*Si tuviese que reducir toda la psicología educativa a un solo principio, enunciaría este: El factor más importante que influye en el aprendizaje es lo que el alumno ya sabe. Averígüese esto y enséñese consecuentemente*” [12].

EL ENFOQUE ENTRÓPICO DE LA TERMODINÁMICA

En los cursos de Termodinámica, las magnitudes no introducidas en los cursos previos de Mecánica (calor, capacidad calórica, energía interna, entropía) se miden de forma indirecta, con la excepción de la temperatura. De aquí que si se desea mantener un orden lógico para el estudiante y acorde a la realidad que se desea describir, todo curso de Termodinámica debiera comenzar por introducir el concepto de temperatura y su medición directa mediante un termómetro, así como los diferentes tipos de termómetros y la ley cero, que describe la posibilidad de utilizar el termómetro para comparar la temperatura de diferentes sistemas.

La proposición de comenzar un curso de Termodinámica a partir de la entropía, cuyos valores se obtienen de forma compleja, a partir de otras magnitudes que tampoco se miden directamente (y que no han sido definidas anteriormente) representa una dificultad inmensa para el estudiante, que

indudablemente hará más difícil el aprendizaje y asimilación del concepto, si es que logra asimilarlo. Vale la pena recordar que el valor de la entropía molar absoluta \bar{S}^0 de cualquier sustancia se calcula, en fase vapor, a partir de los datos experimentales del calor molar \bar{C}_p a cada temperatura por la expresión

$$\bar{S}^0(T) = \int_0^{T_f} \bar{C}_p d(\ln T) + \frac{\Delta \bar{H}_{fus}}{T_{fus}} + \int_{T_{fus}}^{T_{vap}} \bar{C}_p d(\ln T) + \frac{\Delta \bar{H}_{vap}}{T_{vap}} + \int_{T_{vap}}^T \bar{C}_p d(\ln T)$$

Sólido Líquido Vapor

Aquí cada $\Delta \bar{H}$ representa los correspondientes calores molares de fusión y vaporización de la sustancia en cuestión. Por tanto, ¿cómo explicar los valores de una magnitud tan importante para químicos y especialidades afines como la entropía de las sustancias puras de la Tabla II, sin explicar previamente el tercer principio (la entropía molar es nula en el cero absoluto)? ¿O el concepto de calor molar o capacidad calórica? ¿Y sus unidades? Desde luego que, por más vueltas que se le dé, no se puede.

De aquí que tal enfoque entrópico sólo puede conducir a un curso teorístico, desligado de la realidad física y muy confuso para el estudiante, al que no le quedará más remedio que memorizar todo lo que le dicen, sin posibilidad de realizar preguntas lógicas ligadas a otras magnitudes termodinámicas y sin la opción de alcanzar una comprensión razonable sobre el significado de la entropía y sus valores numéricos.

Azufre (rómico)	7.62
N ₂ (g)	45.767
CO ₂ (g)	51.061
Fe ₂ O ₃ (s)	21.5
Etanol(l)	38.4
Metanol(l)	30.3
Benceno(l)	41.30
Ácido oxálico(s)	28.7

OTROS EJEMPLOS CONTRARIOS AL CARÁCTER FACTUAL DE LA FÍSICA

La sobresimplificación de los conceptos. Una desviación bastante común en la enseñanza de la física básica es la sobresimplificación de los conceptos. Como la física usualmente resulta una asignatura difícil para muchos estudiantes, hay profesores que se esfuerzan en simplificar lo más posible los conceptos básicos, tratando de facilitar la comprensión del estudiante. Sin embargo, por esta vía es fácil llegar al error conceptual y a una confusión aún mayor. No pocas veces hemos escuchado, por ejemplo, definir la energía como ‘algo’ capaz de ejercer cambios en los sistemas, sin mencionar como asignar

valores numéricos a esos cambios, –o a ese ‘algo’ misterioso– olvidando por completo que las magnitudes físicas, por el solo hecho de ser magnitudes, son cuantitativas y mesurables.

Y a veces en ese mismo contexto se define la fuerza como una medida de la interacción, capaz de ejercer transformaciones, o empleando palabras semejantes. Como para que existan cambios tiene que haber algún tipo de interacción y transformación, ambas definiciones son demasiado parecidas (prácticamente idénticas, a nuestro modo de ver) haciendo imposible que el estudiante pueda diferenciar claramente el concepto fuerza del concepto energía. En la mencionada ref. [10] aparece una discusión bastante exhaustiva sobre este tema.

La definición de fuerza es menos problemática, pues las fuerzas se miden de forma *directa* con un dinamómetro, y de llevarse a cabo alguna demostración en el aula, el concepto quedará claro. Pero no ocurre así con la energía; como se reflejó en la Tabla I, no existen instrumentos para medir la energía en forma directa, su medición es siempre *indirecta*, a través de otras magnitudes.

Caída de los cuerpos. En ocasiones hemos escuchado en el aula expresiones como esta: “Si despreciamos la fricción del aire, todos los cuerpos caen hacia la Tierra con la misma aceleración de 9.8 m/s^2 ”. Este enunciado se emplea como justificación para introducir de inmediato las ecuaciones que describen el movimiento de caída libre, sin añadir detalles adicionales. Más adelante se hace énfasis en la resolución de esas ecuaciones, e inmediatamente se pasa a resolver ejemplos y ejercicios concretos, donde lo usual es hacer énfasis en los aspectos matemáticos del problema.

Las características físicas que influyen en el valor de g , mostradas en la figura 2, no se mencionan nunca más. Es decir:

- No se esclarece que el valor tomado $g = 9.8 \text{ m/s}^2$ es sólo una aproximación promedio, válida para cuerpos que se encuentran cerca de la superficie de la tierra, y que ese valor se reduce con la altura.
- Tampoco se entra en detalles de que, a causa de la rotación del planeta, g es máxima en los polos y disminuye cuando nos acercamos al ecuador, ni se menciona su intervalo de variación.
- Algo similar sucede con la influencia de las condiciones locales, que pueden causar diferencias mesurables (por ej., cuando hay presentes grandes depósitos de minerales pesados). Y muchas veces se omite la mención de un caso muy cercano a la realidad cotidiana: si el cuerpo cae desde suficiente altura, la fricción del aire hará que la caída se vaya retardando hasta anular la aceleración. A partir de ese momento el cuerpo seguirá cayendo con velocidad constante, con un valor que depende de su masa y forma particular.

La situación es aún más grave en los cursos donde no se

incluyen ejercicios de laboratorio que indiquen cómo medir g experimentalmente, aunque sea por un método muy aproximado. Y, como era de esperar, al obviarse el aspecto factual del asunto, el aspecto formal deductivo pasa a primer plano.

En realidad, siempre que sea razonablemente posible, la presentación de cualquier suceso o evento en física debiera cumplir tres pasos esenciales: experimento \rightarrow explicación \rightarrow confirmación. Es decir, se debe: (1) Presentar el fenómeno tal como ocurre en la naturaleza aunque sea mediante gráficos o en la pizarra (experimento u observación); (2) Proporcionar una explicación diga por qué esto es así (teoría) y; (3) Mostrar algún resultado derivado de la teoría que verifique la justeza de la explicación que se da al fenómeno (confirmación).



Figura 2. Factores que afectan el valor de g .

Las leyes de Newton. Mucho se ha escrito sobre las leyes de Newton. Sin embargo, se obvia el carácter factual de las leyes cuando la 2^{da} Ley se presenta a partir de la ecuación $\vec{F} = m\vec{a}$ sin insistir en forma adecuada cómo se miden las fuerzas, o sin justificar que F es la resultante vectorial de las fuerzas que actúan sobre el cuerpo, resultado obtenido de forma empírica. También las leyes de Newton se mecanizan cuando no se enfatiza en cómo emplear la 3^{ra} Ley para diferenciar las fuerzas que se ejercen sobre el cuerpo de las que él ejerce sobre otros cuerpos al introducir el diagrama de fuerzas. Si faltan estos conocimientos, será imposible que el estudiante aprenda a interpretar esta ley correctamente. En todo caso, lo hará mecánicamente.

Otro aspecto que también se obvia a menudo es no insistir en que las leyes de Newton son válidas para partículas o puntos materiales, donde toda la masa del cuerpo se concentra en un punto (específicamente, en su centro de masa, aspecto que deberá ampliarse después al impartir los sistemas de partículas). Esto puede llevar al estudiante a tratar de aplicar sus conocimientos a situaciones donde no se pueden aplicar.

También es frecuente que se omita la discusión en detalle del origen físico de las determinadas fuerzas; quién o quiénes las ejercen, cuál es su causa, sus propiedades principales, etc., discusión que debería ser exhaustiva, porque justamente ahí está lo factual de la física. Y no es muy raro encontrar que ni siquiera se mencione cómo se miden las fuerzas, la masa o la aceleración, o la equivalencia entre masa inercial y gravitatoria, situación bastante común en cursos de enseñanza media o de física para no físicos donde el trabajo de laboratorio es mínimo, o no existe (figura 3).

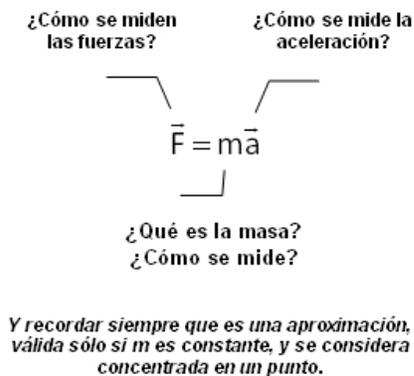


Figura 3. Aspectos factuales importantes a resaltar en los cursos básicos al impartir la 2^{da} ley de Newton.

Motivado por las preguntas usuales en los exámenes de física, donde es muy común que prime el aspecto de la deducción matemática y sean escasas las preguntas conceptuales, el estudiante memoriza la expresión analítica, –que de seguro le hará falta para resolver los problemas– sin atender bien a su significado. Si a esto se suma una pobre presentación previa en la clase de los aspectos físicos como los descritos con anterioridad, el resultado es muy previsible. Aunque el estudiante logre aprobar, su conocimiento de la física y de la realidad que lo rodea será muy deficiente, lo que sin dudas se reflejará en su formación general y en los cursos posteriores para los que la Física resulta básica.

Los autores han sido testigos repetidas veces, al evaluar los contenidos de diversos cursos de física, del desconocimiento de los aspectos factuales básicos por muchos estudiantes. También es común que en las evaluaciones se haga más énfasis en el aspecto matemático formal del problema (despeje de fórmulas, resolución de ecuaciones) que en su correcto planteamiento a partir de las leyes físicas.

En el caso específico de la Mecánica, los pasos lógicos a seguir para identificar y plantear correctamente un problema (no el cómo resolverlo) han sido descritos en otro lugar [13].

Sistemas de partículas. En la Mecánica existen currículos donde se pretende establecer la ley de conservación de la cantidad de movimiento sin introducir previamente el tema de los sistemas de partículas. Se extrapola la mecánica de la partícula a la de los sistemas sin previo aviso y sin introducir previamente el concepto de centro de masa o mencionar los correspondientes experimentos, lo que obviamente será fuente de desconcierto para el estudiante.

Es cierto que ecuaciones tales como la 2^{da} ley de Newton o el teorema del trabajo y la energía son isomorfas para la partícula y para el sistema de partículas; sin embargo, el significado difiere grandemente, pues ahora las leyes se cumplen para el centro de masa del sistema, aunque las partículas estén disgregadas. También es necesario diferenciar entre fuerzas externas e internas al sistema (conservación de la cantidad

de movimiento). Intentar extrapolar las ecuaciones de la mecánica de la partícula a los sistemas de partículas sin esclarecer previamente las diferencias de significado conduce de inmediato a la introducción de falsos conceptos y a la confusión del estudiante.

CARÁCTER ILUSORIO DE ALGUNAS PROPOSICIONES PEDAGÓGICAS

Mientras que las ciencias formales son deductivas, las factuales son esencialmente empíricas. Sin embargo, en el complejo mundo de la educación, no pocas veces se observa confusión entre uno y otro concepto y sus correspondientes métodos de estudio. A menudo se pretende sustituir la enseñanza de las ciencias en los niveles básicos con métodos deductivos propios de las ciencias formales, o incluso con conceptos filosóficos que ni siquiera pertenecen al ámbito de las ciencias, sino de las humanidades. A continuación algunos ejemplos.

Quizás la muestra más notoria e ilustrativa de lo expresado con anterioridad sea el texto de C. Álvarez “*La Escuela en la vida: didáctica*” donde se introducen unas supuestas ‘leyes pedagógicas’, aparentemente ‘descubiertas’ por el autor. Allí se les otorga categoría de leyes a los siguientes enunciados (hay otros parecidos, con ligeras variantes):

- Ley 1. Relación del proceso docente educativo con el contexto social. La escuela en la vida.
- Ley 2. Relación interna entre los componentes del proceso docente educativo. La educación a través de la instrucción.

Un breve análisis muestra de inmediato que no hay verbos en ambas expresiones; por tanto, ninguna de las dos puede indicar acción ni representar una relación de causa-efecto como exige cualquier ley; i.e.; *si tal cosa sucede, tal otra debe (o no debe) suceder*. Es obvio que tales ‘leyes’ no permiten predecir nada, como ocurre con las verdaderas leyes de cualquier ciencia. (Ejemplos: ley de Gresham: el dinero malo *expulsa* al bueno de la circulación. Leyes de Newton: La fuerza *ejercida*...). Sin embargo, en más de una ocasión tales ‘leyes pedagógicas’ han sido aceptadas sin reparo y promocionadas por otros de forma acrítica [14,15,16].

Otras veces se abusa de la semántica, y se altera a conveniencia el significado de los términos científicos. Entre los trabajos citados en uno de los artículos anteriores aparece el titulado “*Aproximación a la teoría pedagógica cubana*” de J. Chávez, donde el término ‘teoría’ aparece tergiversado [17]. La ciencia y sus teorías no son exclusivas de cada país. Una teoría debe abarcar los casos particulares, pero un resultado regional particular – que pudiera ser o no cierto– no constituye una teoría, aunque se base en la evidencia práctica. Para llegar a ser teoría debe ser capaz de mostrar resultados válidos universalmente [1]. Si no fuera así existiría una teoría pedagógica china, otra hindú, otra rusa, otra mejicana, etc., ninguna de ellas científica. Incluso se podría pensar en teorías pedagógicas regionales o municipales. Absurdo.

Una ilusión bastante extendida es tratar de hacer ciencia pedagógica sin números. Las leyes de las ciencias factuales son cualitativas y cuantitativas. Cuando se desea comprobar si cualquier proceso es mejor que otro, son imprescindibles las mediciones (instrumentales o estadísticas). Aún peor es considerar hacer ciencia sin interacción con el sujeto objeto de estudio (los estudiantes, en este caso), sino sólo revisando los resultados de otros, llevados a cabo en otro contexto y la mayoría de las veces sin resultados numéricos. Es bien conocido que los resultados de un determinado proceso docente dependen, en primer grado, de los conocimientos previos del estudiante. Por tanto, resulta bastante obvio que carece de fundamento intentar comparar la efectividad de medios o sistemas de enseñanza si se aplican a estudiantes con diversa preparación previa. Lo que puede ser muy adecuado para un sueco no tiene por qué serlo para un angolano, pues su historial será sin dudas diferente.

Pero note que comparar es sinónimo de medir. Para comparar con precisión hacen falta números. Luego, pretender investigar sin interactuar directamente con los estudiantes y, además, sin emplear estadísticas, no es más que la suma de dos absurdos que nunca podrá conducir a resultados accesibles al escrutinio y la verificación. Al no ser comprobables y verificables mediante el método científico, y por tanto imposibles de refutar, tales propuestas caerían de lleno en el ámbito de la pseudociencia. La imposibilidad de refutar afirmaciones supuestamente científicas es una de las características definitorias –aunque no la única– de las proposiciones pseudocientíficas [18,19]; (ver también ref. [1], p. 7).

La necesidad de hacer énfasis en los experimentos y aspectos factuales también puede conducir al absurdo, si es llevada al extremo. Ese es el caso de algunos sistemas de enseñanza que proponen que el estudiante ‘descubra’ por sí mismo, mediante ensayos y errores, el por qué del comportamiento de diversos eventos o procesos. Como si un adolescente escaso de conocimientos y experiencia, con información muy limitada y empleando un breve lapso de tiempo, pudiera llegar con facilidad a las mismas conclusiones que las mentes más preclaras de su época tardaron muchos años en alcanzar –la mayoría de las veces tras un intenso proceso de intercambios, discusiones y experimentos fallidos–.

CONCLUSIONES

No se debe confundir el enfoque lógico-formal de las Matemáticas con el factual-empírico de la Física y otras ciencias factuales. Las Matemáticas son deductivas y no necesitan de la interacción con la realidad, mientras que las ciencias factuales se dedican a describir las leyes que rigen diversos sucesos o procesos; son ciencias empíricas.

Las magnitudes que se miden directamente debieran estar siempre al inicio de los cursos junto a los correspondientes ejercicios de laboratorio que permiten medirlas. Es de esperar que comenciar un curso de mecánica por el concepto energía, sin presentar y explicar previamente los parámetros necesarios

para lograr medirla y asociarla a la realidad, resultará muy confuso y contraproducente para el aprendizaje.

Por razones análogas, algo similar sucede con la proposición de comenzar un curso de Termodinámica a partir del concepto de entropía –magnitud que se mide indirectamente a partir de otras que también se miden indirectamente– sin introducir previamente los conceptos de temperatura, calor y capacidad calórica, así como su determinación experimental.

Siempre que sea razonablemente posible, la presentación al estudiante de cualquier suceso o evento en Física debería cumplir tres pasos esenciales, 1. Experimento, 2. Explicación (Teoría) y 3. Confirmación.

En los sistemas educativos basados en ensayo y error, resulta bastante absurdo suponer que un adolescente escaso de conocimientos, inexperto y con información muy limitada pueda esclarecer con facilidad lo que las mentes más preclaras de su época tardaron muchos años en alcanzar.

Carece de fundamento tratar de comparar el efecto de diferentes sistemas de enseñanza en estudiantes con diversa preparación previa, más aún cuando no se usan valoraciones cuantitativas en la comparación. Tal proceder conduce a la pseudociencia, al proponer resultados que no pueden ser verificados, contrastados y refutados.

[1] A. González Arias y F. A. Horta Rangel, *Elementos* (Puebla) **87**, 3 (2012).

[2] M. Bunge, *La ciencia, su método y su filosofía*. [http://www.philosophia.cl/Escuela de Filosofía Universidad ARCIS](http://www.philosophia.cl/Escuela%20de%20Filosofia%20Universidad%20ARCIS). Consulta 07/04/2012.

[3] A. González Arias, *Lat. Am. J. Phys. Educ.* **6**, 394 (2012).

[4] A. González Arias, en *VI Taller Iberoamericano de Enseñanza de la Física Universitaria* (La Habana, 2012).

[5] A. González Arias, *Lat. Am. J. Phys. Educ.* **5**, 618 (2011).

[6] L. M. Lederman, *Rev. Cub. Fis.* **20**, 99 (2003).

[7] A. M. E. Figueroa de Lewin y T. Monmany de Lomáscolo, en *VIII Conferencia Interamericana Sobre Educación en Física* (La Habana, 2003).

[8] L. Ortigoza, J. Llovera González y H. Odetti, *Lat. Am. J. Phys. Educ.* **5**, 839 (2011).

[9] F. Herrmann, *Rev. Cub. Fis.* **27**, 113 (2010).

[10] A. González Arias, *Latin Am. J. Physics. Educ.* **2**, 275 (2008).

[11] A. González Arias, *Rev. Iberoam. Educ.* **37**, 1 (2005).

[12] D. P. Ausubel, Y. Novak y H. Hanesian. *Psicología educativa: un punto de vista cognoscitivo*, (Editorial Trillas, México, 1963).

- [13] A. González Arias, *Lat. Am. J. Phys. Educ.* **3**, 403 (2009).
- [14] C. Álvarez de Zayas. *La Escuela en la vida: didáctica*, 3ra Ed. (Pueblo y Educación, La Habana, 1999).
- [15] A. García, I. Peñate y O. Paz, (http://www.quadernsdigitals.net/index.php?accionMenu=hemeroteca.DescargaArticuloIU.descarga&tipo=PDF&articulo_id=8150).
- [16] A. L. Ruiz Ocaña, (<http://www.monografias.com/trabajos26/leyes-pedagogicas/leyes-pedagogicas.shtml>)
- [17] J. Chávez, en *Evento internacional de Pedagogía* (La Habana, 2003).
- [18] M. Bunge, *Las pseudociencias, ¡vaya timo!*, 1ra. Ed. (Editorial Laetoli, Pamplona, 2010), p. 130-132.
- [19] K. Popper, *Conjectures and refutations: the growth of scientific knowledge*, (Basic Books, New York, 1962).

SPONTANEOUS STRAIN AS ORDER PARAMETER TO DESCRIBE THE PHASE TRANSITION IN La^{3+} DOPED PbTiO_3 FERROELECTRIC PEROVSKITE

LA DEFORMACIÓN ESPONTÁNEA COMO PARÁMETRO DE ORDEN PARA DESCRIBIR LA TRANSICIÓN DE FASE EN LA PEROVSKITA FERROELÉCTRICA PbTiO_3 DOPADA CON La^{3+}

Y. MÉNDEZ-GONZÁLEZ^{a†}, A. PENTÓN-MADRIGAL^{b†}, A. PELÁIZ-BARRANCO^b, F. CALDERÓN-PIÑAR^b

a) Departamento de Física Aplicada, Instituto de Cibernética, Matemática y Física, ICIMAF, 15 No. 551, Vedado. La Habana 10400, Cuba. yanela@icimaf.cu[†]

b) Facultad de Física-Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales, Universidad de La Habana. San Lázaro y L, Vedado. La Habana 10400, Cuba. arbelio@fisica.uh.cu[†]

[†] correspondign author.

(Recibido 4/11/2012; Aceptado 6/12/2012)

Spontaneous strains of lanthanum doped PbTiO_3 compound were determined from the temperature dependence of the unit cell parameters. The critical temperature was determined by using the spontaneous strain as order parameter. The calculated value of the critical temperature agrees with that obtained through differential scanning calorimetric measurements. The temperature dependence of the spontaneous polarization was also estimated through the components of the uniform elastic deformations parallel and perpendicular to the [001] crystallographic direction of the perovskite structure.

Las deformaciones espontáneas en el compuesto PbTiO_3 dopado con lantano han sido determinadas a partir de la dependencia de los parámetros de red con la temperatura. La temperatura crítica ha sido determinada haciendo uso de la deformación espontánea como parámetro de orden. El valor calculado para la temperatura crítica se corresponde con el obtenido a través de mediciones de calorimetría de barrido diferencial. La dependencia de la polarización espontánea con la temperatura ha sido igualmente estimada a través de las componentes de las deformaciones elásticas uniforme paralela y perpendicular a la dirección cristalográfica [001] de la estructura perovskita.

PACS: Ferroelectric materials, 77.84.-s; Measurement of strain, 07.10.Pz; X-ray crystallography, 61.05.C-

INTRODUCTION

Lead titanate (PT) is one of the most important ferroelectric systems for technological applications due to their excellent piezoelectric properties [1]. The PT is characterized by its high anisotropy, resulting in a good candidate for high frequency transducers [2]. On the other hand, the PT system exhibits high $c/a = 1,064$ ratio value (tetragonality), leading to a highly fragile material [3,4]. This brittleness can be reduced by the partial substitution of Pb^{2+} with lanthanum ions (La^{3+}), preserving the good properties in the piezoelectric material [4].

PbTiO_3 (PT) crystal exhibits a cubic symmetry above its critical temperature (T_c). The centrosymmetric crystal structure (Pm3m) collapses to tetragonal (P4mm) below the T_c , providing a paraelectric-ferroelectric phase transformation. During this reduction of symmetry, variations in the crystal structure parameters carried out, i.e. from $a = b = c$ for $T > T_c$ to $a = b \neq c$ for $T < T_c$, being invariant the angles between the crystallographic axes. The structural change leads to distortions in the crystal structure, basically along the crystallographic direction [001]. These distortions can be evaluated through

magnitudes as the spontaneous strain. The evaluation of the tetragonal distortion of the lattice, given through the c/a ratio, allows determining the spontaneous polarization (P_s) which is a fundamental ferroelectric property in PT crystals [5].

The ferroelectric properties of PT samples vary once doped with La^{3+} . The effect of the addition of La^{3+} on intrinsic properties, as the critical temperature and the spontaneous polarization can be determined through the spontaneous strain [6]. Previous studies on this system [7] have showed a suppression of the tetragonality and cell volume, and a concomitant decrease in the ferroelectric to paraelectric transition temperature, compared to undoped lead titanate, which is consistent with substitution of La^{3+} ions at the A-site. Consequently, it has been realized high resolution X-ray diffraction experiments as function of temperature in order to estimate these magnitudes for the studied composition. The use of synchrotron X-ray sources allows improving the quality of the diffraction data due to high intensity and resolution of the diffracted beam. Similar studies in PT doped with other lanthanides are currently being conducted. Additionally, the experimental spontaneous polarization

value at room temperature was determined in order to calculate the electrostrictive constants.

EXPERIMENTAL PROCEDURE

The samples were prepared by a ceramic conventional method with the nominal composition $(\text{Pb}_{0.88}\text{La}_{0.08})\text{TiO}_3$. The powders were calcined at 900 °C for two hours in air and the sintering is carried out at 1220 °C for two hours, also in air [7]. The high resolution X-ray diffraction experiments were conducted at the XPD beam line of the LNLS, Campinas, Brazil. A Hubber diffractometer with Bragg-Brentano geometry was equipped with a crystal monochromator of Si (111) and a Ge crystal (111) as analyzer. The measurements were made on a disk like sample from room temperature until well above the critical temperature. The used wavelength was 1.76042 Å and the patterns were collected with a fixed counting time and a step of 0.02 degrees. A LaB_6 sample was used as external standard to remove instrumental contributions to the diffraction profile. The spontaneous polarization value at room temperature was obtained from the hysteresis loops, at 1 Hz, by using a Precision Ferroelectric Tester System (Radiant Technologies INC). The critical temperature, i.e. the ferroelectric-paraelectric transition temperature ($T_c^{\text{DSC}} = 618 \text{ K}$), was determined by using differential scattering calorimetric measurements (DSC) [7].

RESULTS AND DISCUSSION

Figure 1 shows a region of the X-ray diffraction (XRD) patterns of $(\text{Pb}_{0.88}\text{La}_{0.08})\text{TiO}_3$ at several temperatures from room temperature until well above the critical temperature ($T_c^{\text{DSC}} = 618 \text{ K}$). This 2θ region suggests clearly a phase transition to a higher symmetry. Above the T_c^{DSC} the $(100)_T$ and $(001)_T$ peaks merge into a single peak $(100)_C$ as result of the phase transition $4\text{mm} - \text{m}3\text{m}$. The diffraction patterns show an anisotropic broadening, dependent on (hkl) value, below the T_c^{DSC} . The integral breaths of the peaks $(00h)_T$ are larger than that of the peaks $(h00)_T$. It is illustrated by the behavior of the $(100)_T$ and $(001)_T$ reflections in Figure 1. In general, this behavior is observed for the reflections of the type $(00h)_T$ in relation to $(h00)_T$ and $(hk0)_T$. The observed profile broadening is known as *anisotropic microstrain type broadening* [8]. Additionally, the relative intensity of the peaks $(00h)_T$ and $(h00)_T$ is inverted as result of certain texture in the disk like sample, but it does not affect any analysis based on peak positions.

At T_c^{DSC} , the peak $(100)_C$ shows an asymmetry especially on its left side due to some kind of diffuse background. This asymmetry occurs for all peaks in the diffraction pattern and disappears for a higher temperature. This effect could be interpreted as results of remaining regions with a distorted tetragonal structure at this temperature. Previously, some studies on this system have shown that local distortions remain in the cubic phase [9-11].

The degree of the anisotropic microstrain, which is associated with the observed profile broadening is a result of the strain

components perpendicular and parallel to the tetragonal c axis of the perovskite structure. The relations, which are used to determine the spontaneous polarization, and indirectly, the critical temperature from the components of the uniform strains have been previously developed within the framework of the Landau-Ginsburg-Devonshire formalism for the Gibbs free energy [5,2-14] and applied to the particular case of the undoped PT compound [14] and for La^{3+} doped PT considering a different composition [6].

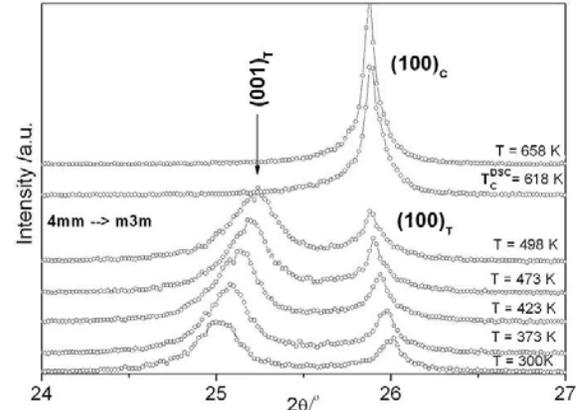


Figure 1. Fraction of the XRD patterns of $(\text{Pb}_{0.88}\text{La}_{0.08})\text{TiO}_3$ as function of temperature. The $(100)_T$ and $(001)_T$ peaks of the tetragonal phase merge into a single peak $(100)_C$, cubic phase, as result of the phase transition $4\text{mm} - \text{m}3\text{m}$.

The La^{3+} doped PT paraelectric cubic phase is taken as reference with zero spontaneous strain and spontaneous polarization values. In its tetragonal structural modification the following relations for uniform deformations holds [6]

$$\begin{aligned} x_1 = x_2 = Q_{12}P_3^2 \\ x_3 = Q_{11}P_3^2, \quad x_4 = x_5 = x_6 = 0 \end{aligned} \quad (1)$$

where x_i are the components of the deformation tensor and Q_{ij} the electrostrictive constants. P_3 is the spontaneous polarization in the $[001]$ direction of the perovskite structure.

On the other hand, the spontaneous deformation values x_1 and x_3 can be determined by using the unit cell parameters calculated for each temperature through the following relations

$$\begin{aligned} x_1 = (a_T - a'_C) / a'_C \\ x_3 = (c_T - a'_C) / a'_C \end{aligned} \quad (2)$$

where a_T and c_T are the unit cell parameters of the tetragonal phase for a given temperature and a'_C is the extrapolated cubic unit cell parameter into the tetragonal region.

The unit cell parameters were calculated from the diffraction patterns by using a least square fit with an external standard and after deconvolution of the diffraction profiles for instrumental broadening and zero correction. To calculate the temperature dependence of the deformation values, the lattice constant of the cubic phase must be extrapolated into the tetragonal region (a'_C). Performing a linear extrapolation of the cubic cell parameter from the region above the critical temperature through a wide temperature range into the room temperature can introduce errors in the determination of a'_C . The former

is a result of the nonlinear behavior of the thermal expansion coefficient reported for many oxides [15].

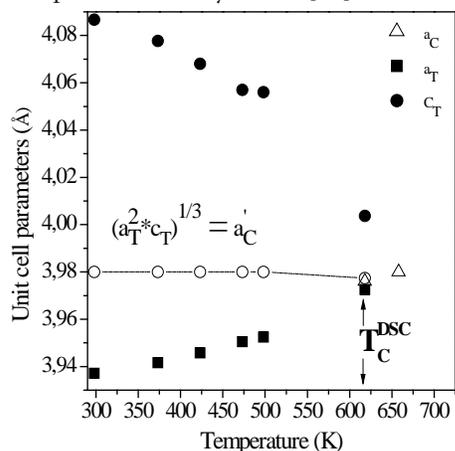


Figure 2. Unit cell parameters and $(a_T^2 c_T)^{1/3}$ as function of the temperature.

On the other hand, in our experiments only a single temperature value above the critical temperature could be measured as result of experimental limitations. Thus, it was not possible to carry out an extrapolation as described above. In this case an alternative method has been used, which consists in determining the magnitude $(a_T^2 c_T)^{1/3}$ [5]. It should not vary with the temperature, as it represents a no volumetric strain in the tetragonal state. In our case a_c' has been assumed as $(a_T^2 c_T)^{1/3}$ in equation (2). Figure 2 shows the temperature dependence of the unit cell parameters and $(a_T^2 c_T)^{1/3}$. The unit cell parameters begin to converge more rapidly by approaching the phase transition temperature, while the parameter $(a_T^2 c_T)^{1/3}$ remains constant in the studied temperature range until the critical temperature. Only from the pattern measured at the critical temperature, $T_C^{DSC} = 618$ K, two set of unit cell parameters were calculated, one for the tetragonal phase and the other one for cubic phase.

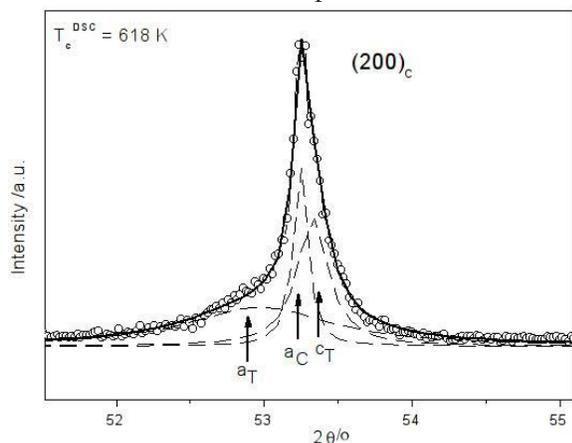


Figure 3. Fitting of the peak $(200)_c$. The experimental data is represented with open circles, the components of the peak, a_T , c_T and a_c with dashed lines, and the calculated peak profiles from the components with solid lines.

Figure 3 shows the fitting result of the peak $(200)_c$ using three functions, which were used to calculate the values of these unit cell parameters. The calculated $(a_T^2 c_T)^{1/3}$ value for the pattern measured at the critical temperature agree with the value of a_c' which supports the idea of having three components in the peak $(200)_c$. The spontaneous strain was calculated using (2)

and is showed in Figure 4 as function of $|T - T_C^{DSC}|^{1/2}$.

The components of the spontaneous strain decrease with increasing temperature, being x_3 the component which decreases faster; hence it determines the spontaneous polarization state of the material. The solid curves represent the linear fit and the dashed one the extrapolation of both x_3 and x_1 . The point where the extrapolated curves intersect can be interpreted as the temperature at which the uniform deformation disappear (T_C^{DRX}). At this temperature the crystal structure goes into a paraelectric state recovering its centrosymmetric nature. However, it should be noted that the interception point is shifted slightly from the horizontal dashed line representing a non-deformation state; but this displacement is of the order of 10^{-3} , which is within the error made determining the spontaneous strain from the unit cell parameters due to some systematic error. The value obtained graphically for the T_C^{DRX} is 623 K, which is only 5 K higher than that of T_C^{DSC} .

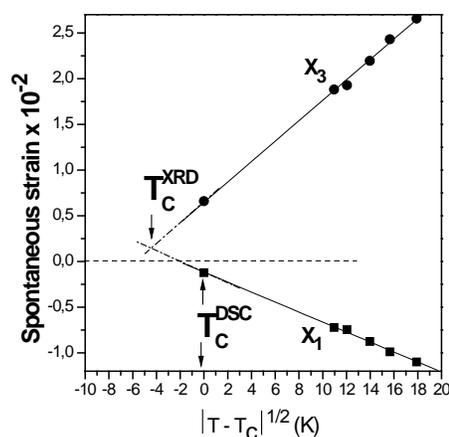


Figure 4. Components of the spontaneous strain values as function of temperature. The intercept point of the curves represents the value of the critical temperature determined from the spontaneous strain (T_C^{DRX}).

The experimental spontaneous polarization value at room temperature, which was obtained from the hysteresis loops, is $P_s = 0.144$ C/m². This value is very shorter than that of the previously reported for undoped single crystal and powder PT [5,14,16] as result of La incorporation in the structure.

Using the spontaneous strain determined by X-ray diffraction experiments at room temperature as well, it was then possible to calculate the electrostrictive constants through equation (1). The coefficients Q_{12} and Q_{11} are known to vary slightly with temperature for a fixed composition, but usually they are assumed to be independent of temperature [5,14,17]. In our case $Q_{12} = -0.53$ m⁴/C² and $Q_{11} = 1.28$ m⁴/C². Under this assumption, the temperature dependence of the spontaneous polarization was determined (Figure 5). As expected, P_s decreases as the temperature approaches the T_C^{DSC} . As previously stated, it seems that at T_C^{DSC} regions with a distorted tetragonal structure still remain. From the crystallographic data, which was obtained at T_C^{DSC} , the value for the spontaneous polarization at the critical temperature was calculated ($P_0 = 0.05$ C/m²), which is one order shorter than that reported for the pure lead titanate at the same temperature [5].

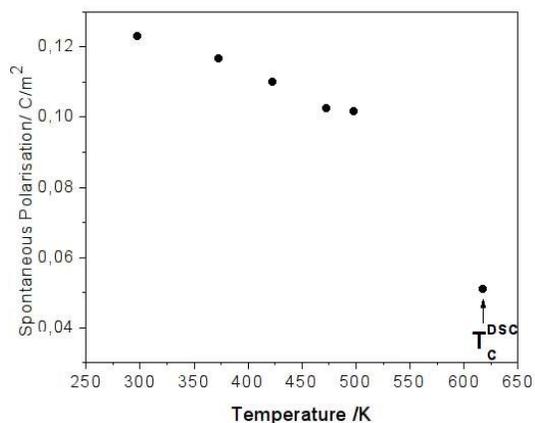


Figure 5. Spontaneous polarization as function of temperature. At the T_c^{DSC} a very low value of the spontaneous polarization could be determined.

Using crystallographic methods it has been possible to study the effect of the La^{3+} addition on intrinsic properties of PT without measuring them directly. As expected, T_c and P_s decrease respect to pure PT compound after La^{3+} addition. The study shows the effective coupling between the spontaneous polarization and the components of the spontaneous deformation.

The method used allows estimating values of P_s as a function of temperature. Usually, for a more accurate calculation, it should be taken into account the fact that the microstructure of the sample varies with temperature. The width of the ferroelectric domain walls increases with the temperature [18]. The domains are regions of crystal imperfections that influence the shape of the diffraction profiles, e.g. asymmetry [19]. The variations in the profile can lead to shifts of Bragg positions and thus to errors in the determination of the unit cell parameters of the crystal structure of ferroelectric domains regions. In the studied polycrystalline disc-shaped sample, asymmetric effects were not significant below the Curie temperature. In the case of the pattern measured at the Curie temperature, the effect of asymmetry was taken into account as referred previously (Figure 3). Furthermore, it has been assumed that crystal defects of other nature, such as vacancies and dislocations, do not contribute to asymmetry effects. It has been shown that the calculated T_c and P_s values could be a guide in tailoring the ferroelectric properties of this kind of perovskite compounds.

CONCLUSIONS

Fundamental ferroelectric properties in La^{3+} doped PT crystals were determined from crystallographic data. The spontaneous strain was used as order parameter to estimate the Curie temperature of the studied system, being in correspondence with the value determined by using the DSC technique. The electrostrictive constants were assumed to be temperature independent and were calculated from the experimental values of the spontaneous strain and spontaneous polarization at room temperature. It was possible to determine the evolution of the spontaneous polarization as function of the temperature. At T_c^{DSC} a very low value of the spontaneous polarization

was calculated suggesting that the structure was not truly centrosymmetric for this temperature.

ACKNOWLEDGMENTS

A. Pentón-Madrigal would like to thank the Program CAPES/MES (328/2011) BRASIL-CUBA for partial financial support. This work has been also supported by the Brazilian Synchrotron Light Laboratory (LNLS) under the proposal D10B - XPD 10695. The ICTP, Trieste-Italy, is also acknowledged for financial support within the Latin-American Network of Ferroelectric Materials (NET-43). Thanks to MSc. Rivelino Flores Farias for technical help.

- [1] E. C. S. Tavares, P. S. Pizani and J. A. Eiras, *Appl. Phys. Lett.* **72**, 897 (1998).
- [2] A. Peláiz-Barranco, J. D. S. Guerra, F. Calderón-Piñar, C. Aragón, O. García-Zaldívar, R. López-Noda, J. A. Gonzalo, J. A. Eiras, *J. Mater. Sci.* **44**, 204 (2009).
- [3] A. Peláiz-Barranco, Y. Méndez-González, F. Calderón-Piñar, D. C. Arnold, D. J. Keeble, J. D. S. Guerra, *Ferroelectrics* **403**, 213 (2010).
- [4] O. Pérez Martínez, “Una interpretación a la Alta Anisotropía Electromecánica en el Titanato de Plomo modificado con tierras raras”. Tesis de Doctorado, Facultad de Física, Universidad de la Habana, Cuba, 2001.
- [5] A. Amin, M. J. Haun, B. Badger, H. A. McKinstry, and L. E. Cross, *Ferroelectrics* **65**, 107 (1985).
- [6] G. A. Rossetti, M. A. Rodríguez, A. Navrotsky, L. Eric Cross and Robert E. Newnham, *J. Appl. Phys.* **77**, 1683 (1995).
- [7] A. Peláiz-Barranco, Y. Méndez-González, D. C. Arnold, P. Saint-Gregoire, D. J. Keeble, *J. Mater. Sci.* **47**, 1094 (2012).
- [8] P. W. Stephens, *J. Appl. Cryst.* **32**, 281 (1999).
- [9] C. C. Chou, C. M. Wayman, *Mater. Trans. -JIM* **33**, 306 (1992).
- [10] M. Takafumi, D. Djibril, I. Shin-Ichi and K. Hiroaki, *Ferroelectrics* **274**, 41 (2002).
- [11] K. Sato, T. Miyanaga, S. Ikeda and D. Diop, *Physica Scripta.* **T115**, 359 (2005).
- [12] A. F. Devonshire, *Philos. Mag.* **40**, 1040 (1949).
- [13] Ekhard K. H. Salje, *Acta Cryst.* **A47**, 453 (1991).
- [14] M. J. Haun, E. Furman, S. J. Jang, H. A. MacKinstry and L. E. Cross, *J. Appl. Phys.* **62**, 3331 (1987).
- [15] W. D. Kingery, H. K. Bowen and D. R. Uhlmann. *Introduction to Ceramics* (Wiley, New York, 1976).
- [16] S. C. Abrahams, S. K. Kurtz, and P. B. Jamieson, *Phys. Rev.* **172**, 551 (1968).
- [17] W. Cao and L. E. Cross, *Phys. Rev. B* **44**, 5 (1991).
- [18] H. Boysen, *Z. Kristallogr.* **220**, 726 (2005).
- [19] M. J. Hoffmann, H. Kungl, R. Theissmann. *Piezoelectricity, Evolution and Future of a Technology* (Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, 2008) pp. 403 – 421.

DINÁMICA ESTRUCTURAL FOTOINDUCIDA EN SÓLIDOS DE GASES NOBLES

PHOTOINDUCED STRUCTURAL DYNAMICS IN NOBLE GAS SOLIDS

A. MARTÍNEZ MESA[†] Y L. URANGA PIÑA[‡]

a) Facultad de Física, Universidad de la Habana. CP 10400, La Habana, Cuba.

aliezer@fisica.uh.cu[†], llinersy@fisica.uh.cu[‡]

[†] autor para la correspondencia.

(Recibido 11/10/2012; Aceptado 6/11/2012)

La investigación de las propiedades estructurales y la dinámica de relajación fotoinducida de matrices y clusters de gases nobles dopados ha experimentado un progreso acelerado durante las últimas dos décadas. La marcada sensibilidad de los estados electrónicos de la impureza a los cambios en su entorno permite caracterizar, con gran precisión, la evolución de los procesos dinámicos en fase condensada. Los sistemas formados por átomos de gases nobles, a bajas temperaturas, además de presentar grandes ventajas para los estudios de espectroscopía molecular, exhiben propiedades únicas, de gran interés desde el punto de vista fundamental, derivadas de la notable influencia de los efectos de delocalización cuántica sobre la dinámica del sistema. En esta contribución se brinda una panorámica de algunas de las herramientas experimentales y los métodos teóricos empleados en la actualidad en este campo, para el estudio del reordenamiento geométrico y de los mecanismos de transferencia de energía en el medio, así como algunos ejemplos ilustrativos que han contribuido, en años recientes, a moldear nuestra comprensión de estos fenómenos.

The investigation of the structural properties and the photoinduced relaxation dynamics of noble gas matrices and clusters has experienced an accelerated progress during the last two decades. The marked sensibility of the electronic states of the impurity to the modifications in the environment enables the accurate characterization of the time-evolution of the dynamical processes in condensed phase. Noble gas systems at low temperature, apart from their great advantages for molecular spectroscopy studies, exhibit unique properties from the fundamental point of view, derived from the significant influence of quantum delocalization effects on the dynamics of the system. In this review, an overview is presented of some of the experimental and theoretical tools used nowadays, in the study of the geometrical rearrangement and the mechanisms of energy transfer into the medium, as well as several illustrative examples that have contributed, in recent years, to shape our understanding of these phenomena.

PACS: Femtosecond probes of molecules in solids and of molecular solids, 82.53.Xa; Time-resolved optical spectroscopies and other ultrafast optical measurements in condensed matter, 78.47.+p; Computer simulation of molecular and particle dynamics, 83.10.Rs; Other topics in quantum fluids and solids; liquid and solid helium, 67.90.+z

I. INTRODUCCIÓN

Durante las últimas décadas, el progreso en las técnicas de espectroscopía en el dominio temporal ha desencadenado un gran número de investigaciones experimentales y teóricas, dedicadas a la comprensión de procesos dinámicos básicos en sistemas moleculares. En los sistemas de láseres ultrarrápidos modernos un primer pulso electromagnético desencadena una reestructuración dinámica mientras que un segundo pulso, retardado en el tiempo, es usado para monitorear los movimientos atómicos en escalas de tiempo del orden de los femtosegundos (f_s) [1] (ver Figura 1). La energía correspondiente a cada longitud de onda del pulso láser de sondeo coincide con la diferencia de energía potencial entre los estados excitados 1 y 2 para ciertas configuraciones del sistema, representadas por R^* en este esquema. En los casos en que es posible identificar R^* con una coordenada colectiva con significado físico directo, se podrá observar la evolución dinámica de esta coordenada y conocer, con mayor profundidad, los mecanismos de reorganización y de redistribución de la energía entre los

distintos grados de libertad del sistema.

La espectroscopía de femtosegundos constituye una poderosa herramienta que permite investigar una amplia variedad de mecanismos en física, química y biología. Algunos de estos procesos aparecen resumidos en la Figura 2. Las mediciones comprueban la estructura molecular alrededor del centro ópticamente activo, mientras que la influencia del carácter macroscópico del medio (sólido, líquido, proteína) es secundaria. Como consecuencia, las fronteras tradicionales entre estas ramas del conocimiento se vuelven difusas. Las técnicas de bombeo-sonda son especialmente valiosas para el estudio de la dinámica de los estados excitados en fase condensada, asociada con las propiedades ópticas y electrónicas de estos sistemas.

El nacimiento de esta técnica experimental puede situarse alrededor de 1950, cuando fueron reportados los primeros estudios en la escala de tiempo de los microsegundos, utilizando la fotólisis inducida por destellos luminosos [3,4]. El procedimiento utilizado consistía en la generación,

por medios electrónicos, de una intensa descarga de luz que creaba radicales en la muestra. Los espectros de estos radicales eran registrados usando un segundo pulso luminoso. En estos experimentos fue posible observar algunas especies intermedias relativamente estables. La construcción del primer láser de rubí en 1960, sentó las bases para la generación, durante los años siguientes, de pulsos electromagnéticos de corta duración y gran intensidad: con anchos del orden de los nanosegundos en 1961 [5] y picosegundos en 1966 [6]. En 1987 se obtuvo, por primera vez, un pulso láser de femtosegundos (6 fs) [7]. Tras la introducción de los láseres de estado sólido de titanio-zafiro, en 1991, la generación de pulsos de femtosegundos se convirtió, cada vez más, en una herramienta estándar en los laboratorios de espectroscopía molecular [8].

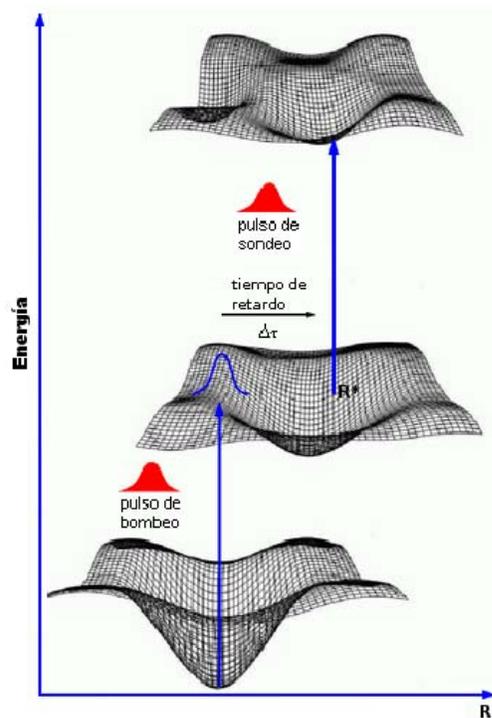


Figura 1. Representación esquemática de la técnica de bombeo-sonda. El pulso de sonda, retrasado un intervalo de tiempo $\Delta\tau$ con respecto al pulso de bombeo, promueve el paquete de ondas al estado excitado 2. La fluorescencia desde este último estado es la señal que se mide en el experimento.

Desde entonces, muchos esfuerzos han estado dirigidos al estudio de la absorción óptica en matrices de gases nobles dopadas. Esta técnica ofrece la oportunidad de obtener información espectroscópica tanto sobre la impureza como del medio circundante, a partir de la comparación entre los resultados de las mediciones en fase condensada y la espectroscopía de la molécula aislada. Debido a la debilidad de las interacciones entre la molécula y su entorno, unido a la transparencia del sólido en el rango ultravioleta del espectro electromagnético, las matrices de gases nobles son especialmente convenientes para los estudios de espectroscopía molecular. Por otra parte, los sólidos de gases nobles son obtenidos mediante deposición directa de los gases correspondientes, en condiciones criogénicas. Debido a este enfriamiento, la densidad de estados accesible a las moléculas

insertadas se reduce significativamente, minimizando la complejidad del sistema, especialmente desde el punto de vista de la modelación teórica.

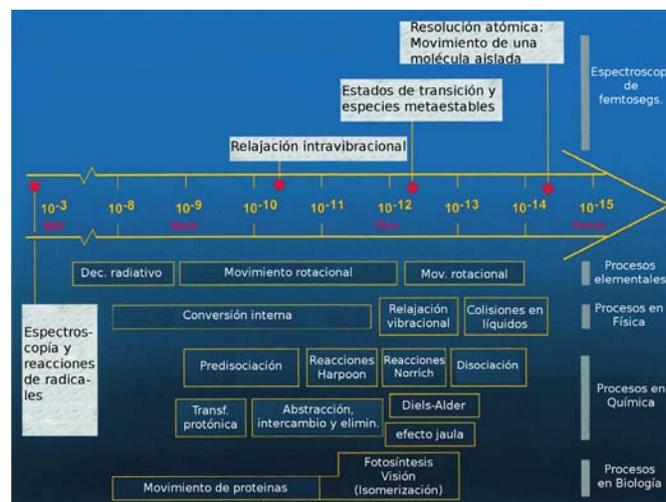


Figura 2. Escalas de tiempo características de los procesos moleculares en física, química y biología. Adaptado de la Ref. [2].

A nivel microscópico, la excitación electrónica de la impureza por el pulso luminoso causa una redistribución de la densidad electrónica de la molécula, la cual es seguida por la reorganización estructural del medio circundante. Se espera que este proceso básico esté presente en cualquier reacción química en fase condensada. La excitación de estados de Rydberg de la molécula blanco resulta particularmente interesante debido a que, durante este proceso, un electrón es promovido a un estado electrónico con número cuántico principal distinto al del estado inicial. Por lo tanto, la excitación conduce a una modificación significativa de la densidad de carga de la impureza y de su interacción con el medio circundante.

En particular, los dihalógenos (Cl_2 , Br_2 , I_2 , F_2 y ClF) en argón sólido han sido estudiados extensamente, tanto desde el punto de vista experimental como teórico [9-16,128]. En estos sistemas, los estudios en el dominio temporal han esclarecido muchos efectos interesantes como el movimiento coherente de los átomos de gas noble circundantes ante la fotoexcitación de la impureza [13,17-20], el desfasaje de las vibraciones de la molécula diatómica [17,21] o la inversión ultrarrápida del espín [12,15,22]. Adicionalmente, se han realizado experimentos de bombeo-sonda para moléculas de NO en matrices de gases nobles [23-28] y para-hidrógeno [29-34]. Muchos de estos estudios fueron realizados en matrices de argón. Sin embargo, al moverse hacia los átomos de gases nobles más ligeros o incluso al hidrógeno molecular, la dinámica inducida de la matriz exhibirá efectos cuánticos más pronunciados.

Debido a que tanto la excitación inicial como la detección involucran procesos moleculares colectivos, la modelación teórica de los experimentos en el dominio temporal es importante para la interpretación de los resultados, con el objetivo de obtener una representación detallada de los procesos

dinámicos estudiados. Sin embargo, el tratamiento teórico de la dinámica cuántica fuera del equilibrio y la interpretación teórica de las señales experimentales para fenómenos que involucran un gran número de átomos constituye un reto considerable para la física molecular contemporánea [35].

Como se desprende los ejemplos anteriores, el campo de la espectroscopía en matrices es extremadamente rico y se encuentra interrelacionado con muchos fenómenos físicos muy distintos entre sí. Las secciones siguientes centran su atención en la discusión de las propiedades estructurales y la reorganización geométrica de las matrices de gases nobles, como consecuencia de la fotoexcitación electrónica de uno de sus átomos o de una impureza. Luego de una breve presentación de los efectos de delocalización cuántica sobre las propiedades estructurales y dinámicas de los sólidos de gases nobles (Sección II) y de los fundamentos de la espectroscopía de femtosegundos (Sección III), en la Sección IV se resumen las técnicas más utilizadas para la simulación computacional de procesos dinámicos en los sólidos de gases nobles. Las secciones siguientes (V y VI) exploran diferentes representaciones cuasiclásicas de la dinámica de reordenamiento configuracional del sistema, tras la fotoexcitación de estados de Rydberg de constituyentes atómicos y moleculares o la fotodisociación de moléculas, cómo estas se relacionan con los resultados experimentales, con los obtenidos mediante la propagación de paquetes de ondas y cómo pueden ser utilizadas en la práctica para calcular la evolución temporal de las propiedades y la estructura microscópica de los sistemas cuánticos. Finalmente, el estado actual de la temática y sus perspectivas de desarrollo, inmediatas y futuras, se resumen en la Sección VII.

II. EFECTOS CUÁNTICOS

En años recientes, las técnicas basadas en la formulación en integrales de camino de la mecánica cuántica [47,48,129,130] y los métodos de resolución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para sistemas de muchos cuerpos, tales como el método de Hartree multiconfiguracional dependiente del tiempo (MCTDH, por sus siglas en inglés) [36-39], han experimentado un desarrollo significativo. A pesar de este progreso, las simulaciones con Dinámica Molecular constituyen aún la herramienta más utilizada para el estudio de procesos dinámicos en sólidos cuánticos [9,14, 15,19,27,34,41,42], debido al alto costo computacional de los métodos más sofisticados. La modificación del estado dinámico del sistema, de acuerdo con las leyes de la mecánica clásica, es local en las variables del espacio de fases, lo que implica un considerable ahorro en cuanto a capacidades de almacenamiento y tiempo de cálculo requeridos para integrar numéricamente las ecuaciones de movimiento, comparado con la solución del problema cuántico correspondiente. No obstante, en cualquier descripción clásica, la función de onda total del sistema de muchos cuerpos es representada a través de paquetes de ondas uniparticulares que no son autofunciones del Hamiltoniano. El uso de paquetes de ondas uniparticulares trae aparejadas fluctuaciones de la energía total del sistema,

que pueden simularse a través de una temperatura adicional. Como consecuencia, la temperatura efectiva, a la que se simula el sistema clásico, debe ser mayor que la del sistema real.

Para sistemas compuestos por partículas puntuales, para temperaturas relativamente altas, la validez de la hipótesis clásica puede comprobarse a través de la longitud de onda térmica de de Broglie

$$\Lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}, \quad (1)$$

donde m es la masa de las partículas. Las propiedades termodinámicas en equilibrio pueden calcularse clásicamente si se satisface la relación $\Lambda/a \ll 1$, donde $a = \rho^{-1/3}$ es la distancia promedio entre vecinos más próximos. Los valores de esta relación para distintos gases nobles a la temperatura del punto triple se muestran en la Tabla I.

Por otra parte, el parámetro de de Boer,

$$\lambda = \frac{\hbar}{\sigma(m\varepsilon)^{1/2}} \quad (2)$$

donde ε representa la energía característica de la interacción interatómica, proporciona una medida cuantitativa de la importancia de los efectos cuánticos en fase condensada, para $T = 0$ K. Este parámetro evalúa la extensión de la función de onda de una partícula, teniendo en cuenta el potencial en el que se encuentra confinada. Para $\lambda \ll 1$ se puede afirmar que el sistema se comporta clásicamente, los efectos cuánticos se vuelven apreciables a medida que se incrementa el valor de λ . Los valores del parámetro de de Boer, para los distintos sistemas formados por átomos de gases nobles y de para-hidrógeno, aparecen recogidos en la Tabla I.

Mientras que los sólidos de argón y los gases nobles más pesados pueden aproximarse bien como un conjunto de osciladores armónicos clásicos entre 0 K y la temperatura del punto triple, los indicadores mostrados en la Tabla I sugieren que los efectos cuánticos son alrededor de tres veces más relevantes para los cristales de neón que para el argón sólido.

Tabla I

Indicadores del grado de delocalización cuántica (parámetro de de Boer λ y relación Λ/a , entre la longitud de onda térmica de de Broglie y el espaciado medio entre las partículas a la temperatura del punto triple T_t) para los sólidos de gases nobles y para-hidrógeno. Los valores experimentales de T_t , utilizados en el cálculo, fueron extraídos de la Ref. [40].

	$T_t(K)$	Λ/a	λ
p-H ₂	14.05	0.970	0.274
Ne	24.50	0.260	0.095
Ar	83.80	0.083	0.030
Kr	117.0	0.046	0.017
Xe	162.0	0.028	0.010

Existe una vasta literatura dedicada a los métodos de simulación de sistemas cuánticos de muchos cuerpos basados

en la implementación del formalismo de integrales de camino, incluyendo aplicaciones a sólidos, líquidos y clusters dopados [48,129,130]. Junto a estos métodos de simulación rigurosos, los cuales son aplicables estrictamente al estudio de sistemas en equilibrio, coexisten tratamientos aproximados como la introducción de una temperatura efectiva, de un potencial efectivo dependiente de la temperatura y la densidad o de paquetes de onda uniparticulares con forma gaussiana, que permiten incorporar los efectos cuánticos en simulaciones de procesos dinámicos. En la Sección IV, se delinean las características generales de las herramientas más utilizadas en la simulación de matrices y clusters de gases nobles dopados.

III. ESPECTROSCOPIA DE FEMTOSEGUNDOS

Como se mencionó en la introducción, la inserción de pequeñas concentraciones de especies moleculares distintas constituye un procedimiento útil para el estudio de las interacciones intermoleculares en fase condensada. Si la molécula incorporada es seleccionada de forma que su rango de absorción óptica no interfiere con el de las moléculas que forman el medio en que está embebida, entonces es posible acceder experimentalmente a los niveles electrónicos de la misma y obtener de esta manera información de carácter local. A pesar de que únicamente la absorción óptica de la molécula es estudiada experimentalmente, las energías de sus estados electrónicos reflejan la influencia del material en que está disuelta. Las interacciones electrostáticas o de dispersión entre la impureza y el medio circundante provocan el corrimiento de las energías de las transiciones entre niveles electrónicos con respecto a sus valores en fase gaseosa. Adicionalmente, las fuerzas ejercidas sobre la molécula huésped pueden causar cambios en su geometría, los cuales, a su vez, también modifican las energías de los estados electrónicos. Además de las posiciones de las líneas espectrales correspondientes a la absorción, sus anchos también de ven afectados por el acoplamiento entre los modos de excitación adicionales presentes en el material dopado (como los fonones de la red) y los estados electrónicos de la impureza. Luego, la medición de las energías de transición electrónicas de las moléculas embebidas proporciona información sobre la interacción con su entorno (a través de los corrimientos espectrales) y acerca de los procesos dinámicos en el sistema dopado (mediante los anchos de las líneas).

La espectroscopía tradicional está basada en la utilización de trenes de ondas electromagnéticas que pueden considerarse infinitamente largos. Estas ondas monocromáticas inducen excitaciones elementales del sistema con energías bien definidas, por lo que esta técnica se conoce también como espectroscopía en el dominio de las frecuencias. En la espectroscopía de femtosegundos, por otra parte, el campo electromagnético interacciona con la muestra durante intervalos de tiempo cortos, comparados con la escala en que ocurre el proceso que se desea estudiar. Como consecuencia de su corta duración, el pulso luminoso contiene un rango finito de frecuencias. La acción del pulso está bien localizada temporalmente, lo que

permite seguir los movimientos atómicos (cuya velocidad típica es de alrededor de 1 km/s), de manera que para registrar desplazamientos del orden de 1 \AA ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$) se necesita una resolución menor que 100 fs (tiempo medio que tarda un átomo en recorrer una longitud de 1 \AA). Las técnicas de generación de pulsos láser ultrarrápidos han permitido hacer realidad la exploración directa de los procesos que ocurren en estas escalas temporal y espacial.

Para estudiar los procesos que ocurren en escalas de tiempo del orden de los femtosegundos, es necesario controlar el intervalo relativo entre los sucesos. Con este fin, los pulsos láser de bombeo y de sondeo son producidos de forma sincronizada. Posteriormente, el pulso sonda es retrasado haciéndolo recorrer un camino óptico de longitud variable. La velocidad finita de propagación de la luz se traduce en una diferencia al cabo del cual arriban ambos pulsos a la muestra. Por ejemplo, si el pulso de sondeo recorre una distancia adicional de $1 \mu\text{m}$, esto equivale a un retardo de 3.3 fs con respecto al pulso de bombeo. El esquema de la Figura 3 ilustra un diseño experimental típico de este tipo de experimentos. En éste, el primer pulso que llega a la muestra (de bombeo) fotoexcita a la impureza o al centro ópticamente activo y desencadena la reestructuración dinámica del medio alrededor de este último. El segundo pulso láser (o láser de sondeo), llega a la muestra con un retardo con respecto al primero. Este pulso induce una transición a un estado excitado superior, de forma que es posible medir la población transferida a partir de la fluorescencia desde este último estado.

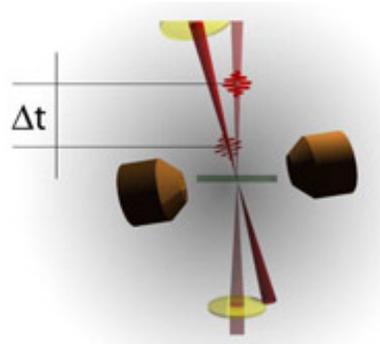


Figura 3. Esquema de un experimento de bombeo-sonda.

La fluorescencia inducida por el segundo pulso láser fue el primer método de sondeo utilizado, pero más tarde se incorporaron la espectrometría de masas y las técnicas de óptica no lineal. Actualmente coexisten un gran número de métodos de sondeo y nuevas técnicas son desarrolladas continuamente, siendo la explosión coulombiana (para la detección de los estados de transición) uno de los más novedosos [2].

En dependencia del espaciamiento entre los niveles de energía del sistema bajo estudio pueden producirse dos escenarios diferentes. Si la separación entre las energías correspondientes a los estados estacionarios del blanco molecular es mucho mayor que el rango de energía de los fotones del láser de bombeo, entonces se excitará uno sólo de estos estados (suponiendo que la frecuencia del láser está sintonizada para excitar un estado

determinado). Por el contrario, si el intervalo de energías de los fotones es mayor, en general se induce la formación de un paquete de ondas vibracional a partir de la superposición coherente de los estados estacionarios del blanco, como se ilustra en la Figura 4. La superposición de las funciones de onda estacionarias, con diferencias de fases escogidas apropiadamente, puede producir un paquete de ondas localizado en el espacio de fases. Usualmente el paquete tiene una posición y una velocidad de grupo bien definidas, dentro de la escala atómica, de forma que su movimiento es análogo al de una partícula clásica. Mientras el grado de localización del paquete, cuyo ancho típico es $\sim 0.05 \text{ \AA}$, sea al menos un orden de magnitud menor que el espacio accesible ($\sim 0.5 \text{ \AA}$ o mayor), la descripción en términos de los conceptos clásicos de posición y momentum está completamente justificada.

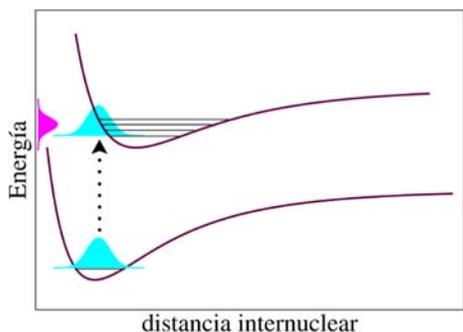


Figura 4. Formación de paquetes de ondas vibratorias mediante la superposición de estados estacionarios.

IV. MÉTODOS DE SIMULACIÓN

Los sistemas moleculares, formados por átomos de gases nobles, en estado puro o en presencia de impurezas, han sido usados con asiduidad para la descripción y comprensión de los principios básicos de los reordenamientos configuracionales fotoinducidos en sistemas de muchos cuerpos [26,31,74,76]. Los estados de Rydberg e iónicos en sistemas moleculares se caracterizan por una distribución espacial de los orbitales electrónicos marcadamente distinta a la del estado básico. Por lo tanto, la fotoexcitación de estos estados, desde el nivel electrónico fundamental, modifica drásticamente las interacciones intermoleculares y conduce a una reestructuración significativa del medio circundante. Este proceso constituye un candidato ideal para la investigación de la respuesta dinámica del entorno a la redistribución de la densidad electrónica de una molécula.

Mientras que existen métodos de simulación bien establecidos, desarrollados a partir de la década del 60, que permiten predecir con gran exactitud el comportamiento dinámico de sistemas clásicos, el tratamiento teórico de la dinámica de sistemas cuánticos con muchos grados de libertad presenta serias dificultades. A las temperaturas criogénicas a las que se forman los sólidos de gases nobles, la descripción de los efectos de la energía de punto cero sobre la dinámica constituye uno de los retos principales. La información contenida en las mediciones obtenidas a través de experimentos de espectroscopía de femtosegundos, llevados a

cabo en estos sistemas moleculares, está directamente relacionada con el grado de coherencia en la evolución temporal del estado del sistema. Este grado de coherencia está determinado por la distribución inicial en el espacio de configuraciones, la cual depende, a su vez, de las amplitudes de punto cero que caracterizan a las vibraciones de la red.

Superficie de energía potencial. Típicamente, los acoplamientos no adiabáticos entre los estados electrónicos básico y excitados son despreciados dentro de la aproximación de Born-Oppenheimer. Como consecuencia, los estados electrónicos están acoplados sólo mediante el pulso láser. La evolución temporal del sistema se describe por el Hamiltoniano

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{H}_{el} + \mu(\mathbf{R}) \cdot \mathbf{E}(t), \quad (3)$$

donde \hat{T} es el operador de energía cinética de los núcleos atómicos, \hat{H}_{el} es el Hamiltoniano del sistema electrónico, que incluye las interacciones coulombianas entre los electrones y de éstos con los núcleos, μ es el operador momento dipolar y $\mathbf{E}(t)$ es la intensidad del campo eléctrico del láser.

La dinámica nuclear puede ser modelada tanto clásica como cuánticamente. En el tratamiento clásico, los operadores en la ecuación anterior son reemplazados por las funciones correspondientes de las coordenadas y momentos de las partículas. En ambos casos, el estado dinámico del sistema evoluciona sobre las superficies de energía potencial $U_\lambda(\mathbf{R})$, donde el subíndice λ identifica el autovalor correspondiente del Hamiltoniano electrónico \hat{H}_{el} . Cada una de las superficies de energía potencial es modelada como la superposición de interacciones entre cada par de átomos de gases nobles (Gn) y la interacción entre estos átomos y la impureza.

$$U_\lambda(\mathbf{R}) = \sum_i V_{imp-Gn}^{(\lambda)}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) + \sum_{i \neq j} V_{Gn-Gn}(R_{ij}), \quad (4)$$

donde los índices i, j recorren todos los átomos de gases nobles. \mathbf{r} , \mathbf{R} y R_{ij} denotan, respectivamente, las coordenadas internas de la impureza, las posiciones de los átomos de gases nobles con respecto a ésta y las distancias entre estos últimos.

En la Figura 5 se ilustra la estructura global de la interacción impureza-gas noble. Las curvas de nivel corresponden al estado electrónico básico de una molécula de monóxido de nitrógeno que interactúa con un átomo de argón [49]. En el diagrama se ilustran las conocidas coordenadas de Jacobi: los vectores \mathbf{r} y \mathbf{R} , cuyos módulos coinciden con la distancia de enlace de la molécula diatómica (r) y la distancia R desde el átomo de gas noble al centro de masas de la molécula, además del ángulo α entre ambos vectores. El potencial de interacción depende débilmente de la orientación relativa entre \mathbf{r} y \mathbf{R} . Como consecuencia, la influencia de la interacción impureza-gas noble sobre las propiedades dinámicas del sistema está determinada, en primera aproximación, por el promedio isotrópico del potencial V_{imp-Gn} . En el panel inferior de la Figura 5, se representa este promedio isotrópico en el caso de una molécula de NO que interactúa con distintos átomos de gases nobles (Ne, Ar, Kr). Como se aprecia, la energía característica

de enlace impureza-gas noble varía entre 40 cm^{-1} y 110 cm^{-1} , mientras que la distancia de equilibrio del potencial $V_{\text{imp-Gn}}$ varía en el rango $3.5\text{-}4.0 \text{ \AA}$, dependiendo del elemento químico considerado. En años recientes, un considerable esfuerzo ha sido dedicado a investigar la influencia de las interacciones impureza-gas noble, evaluadas a partir de primeros principios, sobre las propiedades espectroscópicas de las matrices de gases nobles dopadas [49-54].

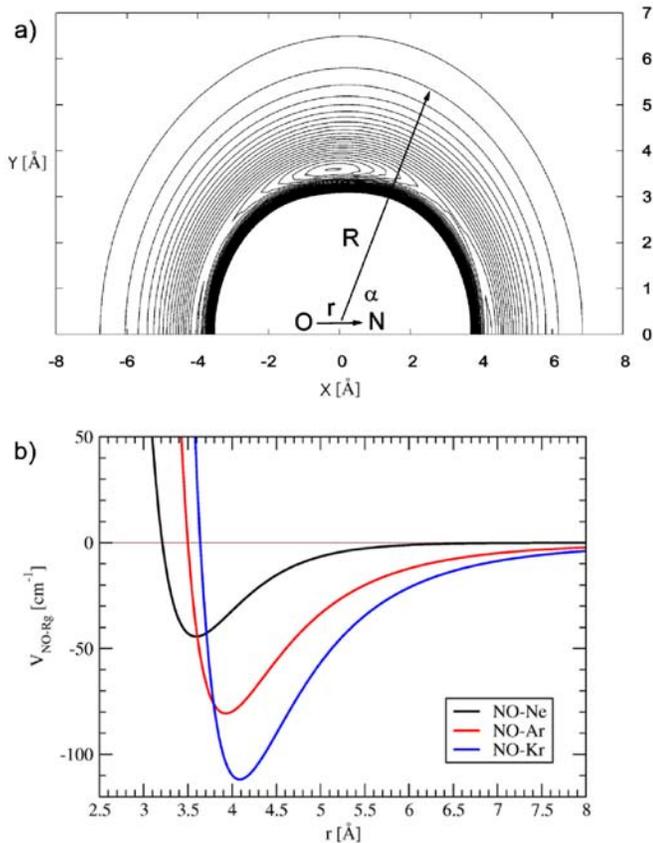


Figura 5. (a) Superficie de energía potencial correspondiente al estado electrónico básico del sistema NO-Ar (Ref. [49]). (b) Promedios isotrópicos de las interacciones NO-Rg (Rg = Ne, Ar, Kr) [49, 52, 54] en el estado electrónico básico.

Los potenciales por pares $V_{\text{Gn-Gn}}$ suelen incluir de forma efectiva los efectos de muchos cuerpos sobre la energía de interacción. Las estimaciones realizadas de la corrección adicional a la superficie de energía potencial global, al tener en cuenta las contribuciones de muchos cuerpos, muestran que estos efectos no modifican apreciablemente los valores de las propiedades estructurales y energéticas calculados dentro del esquema de superposición de potenciales por pares [55-60].

Dinámica Molecular Clásica (DMC). Las ecuaciones clásicas de movimiento son resueltas usualmente dentro de la formulación de Newton, empleando el algoritmo de velocidades de Verlet [62]. Un tratamiento puramente clásico no puede reproducir los efectos cuánticos presentes en sólidos de para-H₂ o Ne [30, 33], por lo que los estudios llevados a cabo mediante la técnica de DMC a menudo incorporan el efecto de la energía de punto cero sobre las oscilaciones de los átomos del cristal a través de una temperatura efectiva T_{ef} . Las condiciones iniciales son seleccionadas aleatoriamente,

de forma que satisfagan la distribución en el espacio de fases correspondiente al ensemble canónico a la temperatura efectiva T_{ef} . Esta última se calcula igualando la distribución clásica de un oscilador anarmónico, cuya frecuencia es representativa de las frecuencias de vibración de los átomos en el sólido, a los elementos diagonales de la matriz densidad en la representación del operador de posición. Estos elementos se calculan dentro del formalismo de integrales de camino, incluyendo los diagramas de Feynmann hasta primer orden en la constante de anarmonicidad [70].

A la temperatura efectiva correspondiente, derivada dentro de la aproximación armónica de las oscilaciones de la red [43], la denotaremos CCAA (corrección cuántica dentro de la aproximación armónica). A pesar de que la hipótesis armónica ha sido ampliamente utilizada para simular los efectos de la energía de punto cero en sólidos cuánticos, es preciso notar que las contribuciones anarmónicas al potencial de interacción juegan un papel importante en la determinación de las propiedades vibracionales de, por ejemplo, el neón sólido, incluso para el estado básico [68,69]. Esta característica explica el hecho de que la temperatura efectiva ($T = 37 \text{ K}$), usada en las simulaciones previas con DMC de la dinámica de relajación de matrices de neón dopadas con NO, para reproducir las condiciones experimentales ($T = 4 \text{ K}$), se encuentra por encima del punto de fusión del cristal de neón. Este ejemplo ilustra la necesidad de emplear formas más sofisticadas de incorporar los efectos de la energía de punto cero en estos sistemas.

Las transiciones electrónicas inducidas por el pulso electromagnético son modeladas, de forma aproximada, por la sustitución instantánea de la superficie de energía potencial del estado inicial por la correspondiente al estado final. Dentro de esta aproximación, la intensidad de la transición entre dos estados λ y λ' puede escribirse

$$I_{\lambda\lambda'}(\omega) \propto |\mu_{\lambda\lambda'}|^2 \left| \int \rho_{\lambda}(\mathbf{R}) \delta(E_{\lambda'}(\mathbf{R}) - E_{\lambda}(\mathbf{R}) - \hbar\omega) d^3\mathbf{R} \right|^2, \quad (5)$$

donde ω es la frecuencia del fotón que provoca la transición y ρ_{λ} es la distribución de equilibrio del sistema nuclear.

La estructura del sistema es analizada a través de las funciones de distribución radial impureza-gas noble y entre átomos del sólido y la transformada de Fourier de las componentes de la densidad de partículas.

Las simulaciones mediante el método de Dinámica Molecular Clásica han demostrado ser una herramienta muy poderosa para la descripción de la dinámica estructural de la materia condensada. Esta técnica ha sido aplicada exitosamente para describir la dinámica fotoinducida de moléculas embebidas en sólidos [9,10] y clusters [63,64] de gases nobles o la dinámica del reordenamiento estructural inducido por la redistribución de carga en una impureza disuelta en líquidos [65], clusters [66] y sólidos [25] de gases nobles. Sin embargo, para sistemas a bajas temperaturas, su utilidad está limitada a medios donde las fluctuaciones de punto cero son despreciables con respecto a las distancias intermoleculares.

Dinámica Molecular Cuántica. El tratamiento cuántico de la dinámica de reestructuración del sólido alrededor de la impureza, tras la fotoexcitación de la misma, se realiza resolviendo numéricamente la ecuación de Schrödinger multidimensional dependiente del tiempo. El Hamiltoniano que describe la evolución temporal de la configuración del subsistema formado por los núcleos atómicos, incluye explícitamente las superficies de energía potencial correspondientes a los estados electrónicos básico (X) y excitado (A) y la intensidad del campo eléctrico $E(t)$ del pulso láser que provoca el acoplamiento

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \Psi_X(\mathbf{R}, t) \\ \Psi_A(\mathbf{R}, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_X & -\mu \cdot E(t) \\ -\mu \cdot E(t) & H_A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_X(\mathbf{R}, t) \\ \Psi_A(\mathbf{R}, t) \end{pmatrix}, \quad (6)$$

donde el momento dipolar μ se supone independiente de la configuración nuclear. En los resultados citados en la siguiente sección, esta ecuación de Schrödinger acoplada es utilizada para investigar la dinámica ultrarrápida de reordenamiento alrededor de una molécula de NO fotoexcitada dentro de una matriz de Ne. A diferencia de los métodos basados en simulaciones con DMC, este procedimiento permite una descripción rigurosa de los efectos de delocalización cuántica. En la práctica, la ecuación (6) se resuelve empleando la aproximación de Hartree dependiente del tiempo.

$$\Psi_\lambda(\vec{R}, t) = C(t) \prod_s \phi_\lambda^{(s)}(R_s, t). \quad (7)$$

El subíndice s identifica cada una de las coordenadas generalizadas utilizadas para especificar la configuración del sistema. La parametrización especial de la superficie de energía potencial multidimensional, introducida en la Ref. [67], permite utilizar el paquete de programas MCTDH de Heidelberg [39] para la propagación numérica.

Para comenzar la propagación, el estado inicial se prepara mediante el método de relajación [71]. El método se basa en la introducción del tiempo imaginario $\tau = it$, de forma que la ecuación de Schrödinger puede reescribirse como

$$\frac{\partial \Psi(\mathbf{R}, \tau)}{\partial \tau} = \sum_s \frac{\hbar^2}{2M_s} \nabla_s^2 \Psi(\mathbf{R}, \tau) - V(\mathbf{R}) \Psi(\mathbf{R}, \tau), \quad (8)$$

donde M_s es la masa reducida asociada al grado de libertad s .

Si se consideran únicamente sistemas cuyo Hamiltoniano \hat{H} no depende explícitamente del tiempo, entonces la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo imaginario puede desarrollarse en la base formada por las autofunciones $\varphi_n(\mathbf{R})$ del operador \hat{H} :

$$\Psi(\mathbf{R}, \tau) = \sum_n c_n \varphi_n(\mathbf{R}) e^{-E_n \tau / \hbar}. \quad (9)$$

La contribución de cada uno de los autoestados con energía E_n a la función de onda total decae exponencialmente, siendo el término correspondiente al estado básico el que disminuye más lentamente. Por lo tanto, se puede despreciar

la contribución de los estados excitados a la función de onda en el límite $\tau \rightarrow \infty$. Esto permite obtener la función de onda del estado básico $\Psi_0(\mathbf{R})$, resolviendo iterativamente la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo imaginario sobre la superficie de energía potencial del estado electrónico correspondiente. La función $\Psi(\mathbf{R}, \tau)$ es reescalada después de cada iteración, con el objetivo de mantener constante la norma de la misma. A partir de $\Psi_0(\mathbf{R})$ se evalúan las propiedades de equilibrio del sistema.

V. FOTOEXCITACIÓN DE ESTADOS DE RYDBERG

Excitación electrónica de átomos en cristales puros. Los átomos de gases nobles forman sólidos de van der Waals, débilmente ligados, donde los constituyentes individuales retienen su carácter atómico. La primera transición electrónica en los sólidos de gases nobles se encuentra en el rango ultravioleta, por encima de 8 eV. Esta corresponde a la excitación $np^6 \rightarrow np^5(n+1)s$ de un átomo a su estado de Rydberg de menor energía, formando lo que se conoce como excitón $n = 1$ de Frenkel [72,73]. Los estados de Rydberg de átomos y moléculas, correspondientes a valores pequeños del número cuántico principal, se caracterizan por radios del orbital electrónico del orden de la distancia entre vecinos más próximos en el cristal. Por lo tanto, su excitación causa una fuerte repulsión sobre los átomos vecinos, debida al solapamiento del orbital de Rydberg con las capas cerradas de las especies que rodean al centro excitado. La fuerte repulsión entre el electrón de Rydberg y las nubes electrónicas de los átomos circundantes induce un reordenamiento sustancial de la red alrededor del excitón $n = 1$. Estos reordenamientos estructurales han sido estudiados intensamente utilizando electrones acelerados [74-76] y radiación sincrotrónica en el rango ultravioleta [72,77].

La espectroscopía electrónica (tanto la absorción como la fluorescencia) del sólido de neón ha sido muy estudiada [72,74-80], en particular la formación de excitones atómicos $n=1$ de Frenkel. Este último corresponde a la excitación $3p^6 \rightarrow 3p^5 4s$ del átomo de neón a su primer estado de Rydberg. Como consecuencia de la fuerte repulsión, a cortas distancias, entre el electrón de Rydberg y las capas cerradas de los átomos de gases nobles la banda de absorción presenta un corrimiento pronunciado hacia el azul, comparada con la línea espectral correspondiente en fase gaseosa [72, 74, 77]. La fuerte repulsión induce la relajación de la cavidad que rodea al centro de excitación hacia una nueva configuración de equilibrio, desde donde ocurre la fluorescencia. La separación significativa entre los centroides de las bandas de absorción y emisión, conocida como corrimiento de Stokes, indica que ocurre un reordenamiento a gran escala de la red en la vecindad de las especies excitadas. Los resultados experimentales permiten inferir que el mecanismo básico consiste en que los átomos circundantes son desplazados hacia afuera, de manera que se forma una cavidad alrededor del centro de excitación, fenómeno que es conocido como formación de la burbuja electrónica.

Este proceso de relajación ha sido estudiado teóricamente, utilizando tanto métodos analíticos [81,82] como a través de simulaciones basadas en procedimientos de minimización [79,83,84]. En ambos tipos de cálculos, la hipótesis principal es que la deformación tiene carácter radial. Estos cálculos predicen que la red se expande en una cantidad considerable alrededor del átomo de neón excitado: la primera capa se desplaza aproximadamente 1.0-1.2 Å, lo que corresponde a un incremento del 30-37% de su radio original. Aquellas capas conectadas con la primera a lo largo del eje cristalográfico (110) (la cuarta, la novena, ...) experimentan también importantes desplazamientos. Se ha estimado que, durante este proceso de relajación de la red, son disipados ~0.5 eV, en concordancia con los resultados de las bandas de absorción y emisión del excitón $n = 1$ [72]. Como se destacó anteriormente, el neón sólido representa un sistema modelo para investigar el papel jugado por los efectos cuánticos en los mecanismos de disipación de energía. Los efectos cuánticos en la relajación del sólido de neón excitado electrónicamente han sido investigados dentro de la aproximación de Hartree (independiente del tiempo) [84]. En este estudio, las funciones de onda correspondientes a cada uno de los átomos de Ne fueron representados mediante funciones gaussianas. Cada una de ellas contenía un parámetro variacional que fue determinado minimizando el valor medio del Hamiltoniano total. Como resultado de este procedimiento, se obtuvo un valor de ~30% para la expansión relativa de la primera capa, en lugar del 37.5% encontrado en la Ref. [83].

Debido a la magnitud de esta reorganización, el proceso de formación de una burbuja en el sólido de neón excitado electrónicamente constituye un caso ideal para el estudio de las deformaciones estructurales de gran amplitud en materia condensada. Sin embargo, hasta el momento no existen investigaciones teóricas sobre la evolución temporal de este proceso. Adicionalmente, los estudios experimentales de la dependencia temporal del proceso de relajación ultrarrápida de la red alrededor del excitón $n = 1$ en el sólido de neón puro son prácticamente imposibles, ya que la energía del excitón (~16.85 eV) es difícil de alcanzar con la tecnología actual de láseres de femtosegundos. Por otra parte, la definición de ventanas de observación para los láseres de sonda, que permitan comprobar la evolución temporal del proceso de reordenamiento, resulta problemática [27].

Un enfoque alternativo, ante las dificultades para acceder experimentalmente a información acerca de la dinámica de reestructuración del sólido, es el estudio de cristales dopados. Las características espectroscópicas (corrimientos espectrales, anchos de las bandas y corrimientos de Stokes) del primer estado de Rydberg del monóxido de nitrógeno, por ejemplo, son muy cercanas a las del excitón $n = 1$ en los sólidos puros y también pueden ser interpretadas en términos de la formación de una burbuja [85-87]. Por otra parte, las matrices de gases nobles dopadas poseen la ventaja de que se evita la complejidad adicional, presente en el sólido puro, debida a la posibilidad de transición del excitón entre los distintos centros

atómicos equivalentes, por lo que sólo tiene lugar la relajación puramente estructural.

Matrices de gases nobles dopadas con metales alcalinos. Además de representar un sistema modelo ideal para el estudio experimental y teórico de la relajación estructural debida a la excitación electrónica del cristal puro, el interés en la interacción entre átomos de metales alcalinos (Li, Na, K) y átomos de gases nobles se ha renovado debido fundamentalmente a la medición, en experimentos recientes, del índice de refracción de una onda de materia que atraviesa un medio diluido de átomos de gases nobles [89]. Adicionalmente, estos sistemas moleculares son útiles para el estudio de las interacciones de van der Waals (vdW) desde el punto de vista fundamental. Esto se debe a que, a pesar de que sólo un pequeño número de electrones está involucrado activamente en el establecimiento de estas fuerzas de interacción, los métodos modernos de cálculo *ab initio* no siempre pueden proporcionar descripciones precisas de la profundidad de los pozos de los débiles potenciales de interacción que caracterizan los estados electrónicos básicos, prediciendo incluso curvas de energía potencial puramente repulsivas. Entre otras aplicaciones, el conocimiento de las interacciones débiles de dispersión permite predecir teóricamente y asistir la síntesis de nuevas moléculas e isómeros [88].

Desde el punto de vista práctico, el comportamiento de los átomos alcalinos insertados en sólidos cuánticos, especialmente en para-hidrógeno, también tiene potenciales aplicaciones tecnológicas. Se espera que la incorporación, al hidrógeno sólido, de pequeñas concentraciones de átomos ligeros como el litio, mejore su rendimiento como combustible en la propulsión de cohetes. El espectro de absorción de matrices de para-hidrógeno dopadas con litio o sodio y la influencia de parámetros como la presión externa, la temperatura o la composición isotópica, sobre los centroides y la estructura general de las bandas, han sido investigados detalladamente tanto desde el punto de vista experimental como teórico [90-96]. Los datos recogidos en la Tabla II ilustran la dependencia, con respecto a la presión y a la concentración de impurezas, del corrimiento espectral de las energías de absorción correspondientes a la transición $Li(2p \leftarrow 2s)$, en una matriz de para-hidrógeno. El desplazamiento de las energías de transición, hacia las regiones más (bajas presiones) o menos (altas presiones) energéticas del espectro, es una magnitud macroscópica que refleja la variación de la separación energética entre los potenciales de interacción correspondientes a los estados electrónicos básico y excitado, como consecuencia de la disminución de las distancias relativas entre las partículas.

Por otra parte, estudios similares de la dinámica de relajación de matrices de argón dopadas con Li [97], después de la excitación de la impureza a su primer estado de Rydberg, se han llevado a cabo utilizando la CCAA para calcular la temperatura efectiva a la que se realizaron las simulaciones clásicas. En este caso, el análisis teórico de la fotoexcitación del metal alcalino y la reorganización posterior del medio

circundante permitió correlacionar las características de las superficies de energía potencial disponibles para este sistema con observables específicos que pueden ser comparados directamente con datos experimentales. Se calculó la banda de absorción, utilizando el principio de Franck-Condon, para tres representaciones diferentes de la interacción LiAr. Se observó que la influencia de la matriz reduce la energía de transición en alrededor de 0.3 eV respecto al valor correspondiente en fase gaseosa, mientras que, si no se considera la barrera energética intermedia característica del potencial LiAr en el primer estado de Rydberg, se obtiene un corrimiento adicional de 0.1 eV. Esta diferencia muestra que los espectros de absorción y emisión de átomos alcalinos inmersos en sólidos de gases nobles pueden ser utilizados como herramienta para comprobar la topología de los potenciales interatómicos en estados excitados.

Tabla II

Corrimiento espectral de la energía de absorción correspondiente a la transición $\text{Li}(2p \leftarrow 2s)$ en una matriz de para-hidrógeno, en función de la presión P y el número N_{Li} de impurezas por sitio [95]. Las energías están expresadas en eV.

P (GPa)	$N_{\text{Li}} = 1$	$N_{\text{Li}} = 2$	$N_{\text{Li}} = 3$	$N_{\text{Li}} = 4$
0.02	0.15	0.14	0.13	0.13
0.10	0.20	0.19	0.19	0.18
1.20	0.24	0.27	0.29	0.30
2.40	0.14	0.20	0.25	0.29

La respuesta dinámica del cristal a la excitación electrónica de la impureza muestra comportamientos diferentes de cada una de las capas en las inmediaciones del centro de absorción. Mientras que la primera esfera de coordinación se contrae y la cuarta se expande, como consecuencia de las características principales de la energía potencial LiAr, la segunda y tercera capas ilustran la dependencia de la propagación de la perturbación con respecto a la dirección cristalográfica. Esta dinámica inicial muestra también una fuerte dependencia con respecto al potencial de interacción impureza-gas noble empleado, por lo que este último también puede ser analizado mediante las técnicas modernas de espectroscopía de femtosegundos. Transcurridos alrededor de 0.5 ps este movimiento da lugar a un patrón de oscilaciones complejo alrededor de las nuevas posiciones de equilibrio. Los valores de estos radios indican que una reorganización significativa de la red tiene lugar después de la fotoexcitación.

La posibilidad de emplear las mediciones realizadas en fase condensada, para estudiar las interacciones entre los metales alcalinos y los átomos de gases nobles, puede ilustrarse a partir de los resultados de experimentos llevados a cabo recientemente en matrices de argón y kriptón dopadas con sodio [98]. En la Figura 6, se muestran las bandas de absorción obtenidas experimentalmente (para la transición entre los estados electrónicos $2s$ y $2p$ del átomo alcalino) y las calculadas a través de simulaciones computacionales. Las simulaciones fueron llevadas a cabo considerando tres tipos de sitios para la inserción de los átomos de sodio en la matriz, clasificados de acuerdo a la disposición geométrica de los átomos de gases nobles alrededor de la impureza: Sv (cubo-octaedro), Tv

(tetraedro) y Hv (octaedro). Resulta evidente que los resultados teóricos no pueden reproducir las energías de absorción obtenidas en el experimento. Sin embargo, las técnicas de simulación permiten modificar artificialmente la interacción impureza-gas noble hasta lograr reproducir cualitativamente los espectros medidos. De esta forma, la combinación de las observaciones experimentales y los métodos de simulación computacional permiten describir cómo se modifican las interacciones entre estos elementos en el sólido, con respecto a la fase gaseosa.

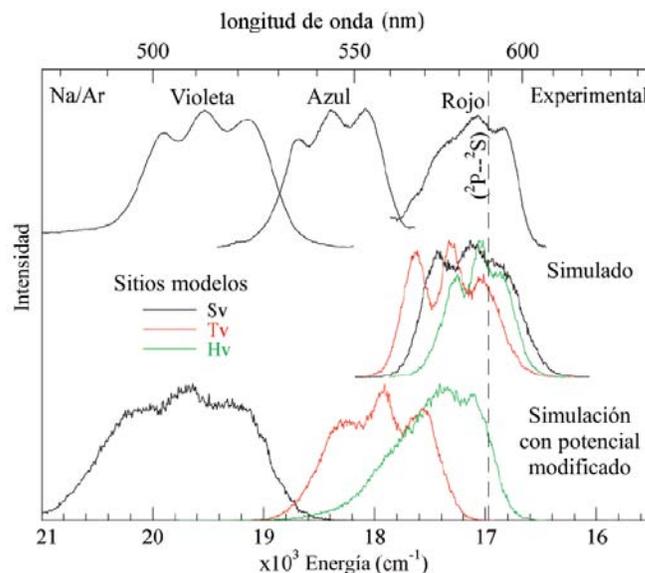


Figura 6. Comparación entre el espectro de absorción medido para la transición $\text{Na}(2p \leftarrow 2s)$ en matrices de argón (panel superior). El panel intermedio indica los resultados correspondientes a simulaciones con DMC utilizando los potenciales de interacción Na-Ar en fase gaseosa. En el panel inferior se representan las bandas de absorción calculadas con el potencial modificado. Adaptado de la Ref. [98].

Matrices de gases nobles dopadas con monóxido de nitrógeno. La combinación de las técnicas de aislamiento matricial y de espectroscopía de femtosegundos ha sido utilizada exitosamente, durante las últimas dos décadas, para acceder a información novedosa, tanto en el dominio temporal como en el de las frecuencias, de una enorme variedad de especies moleculares [99-113]. Dentro de la amplia variedad de los posibles blancos moleculares, el primer estado de Rydberg ($A^2\Sigma^+$ del monóxido de nitrógeno (NO)) resulta propicio para los experimentos de espectroscopía de femtosegundos [8-14]. Adicionalmente, la investigación de las propiedades dinámicas de moléculas de monóxido de nitrógeno embebidas en matrices de gases nobles puede proporcionar una mejor comprensión de su interacción con ambientes biológicos. Este hecho reviste especial importancia, como consecuencia del papel jugado por esta molécula en el metabolismo de las plantas [114] y sus múltiples aplicaciones relacionadas con la salud humana. Por otra parte, la dinámica de relajación de matrices de gases nobles dopadas con NO, a partir de la excitación óptica del primer estado de Rydberg de la molécula, es similar al caso de la creación del excitón $n=1$ de Frenkel en el cristal puro, por lo que también se conoce como formación de una microcavidad o burbuja electrónica. La reorganización de los núcleos atómicos

es acompañada por una cascada de eventos de relajación no radiativos, que ocurren en una escala de tiempo mucho menor (~ 2 ps) que el decaimiento del estado de Rydberg hacia el estado básico o los estados de valencia (~ 200 ns). Por lo tanto, estas últimas transiciones electrónicas tienen lugar desde la nueva configuración de equilibrio del sistema nuclear.

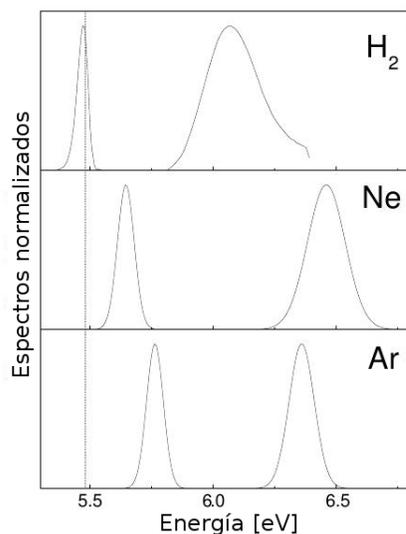


Figura 7. Bandas de absorción ($A \leftarrow X$) y emisión ($X \leftarrow A$) para las matrices de para-hidrógeno, neón y argón, dopadas con NO. La línea vertical indica la energía de la transición entre ambos estados para el NO en fase gaseosa.

En la Figura 7 están representadas las bandas de absorción y emisión, obtenidas experimentalmente, correspondientes a las transiciones entre los estados electrónico básico (X) y primero de Rydberg (A) de la molécula de NO en matrices de para-hidrógeno, neón y argón. A primera vista resalta el hecho de que, en los tres casos, las bandas de absorción están desplazadas hacia el azul (son más energéticas) comparadas con la energía de excitación del NO en fase gaseosa (indicada en la Figura 7 por la línea vertical). Esto refleja la relación mencionada entre las dimensiones del orbital del electrón de Rydberg del NO y el radio de la primera esfera de coordinación, como consecuencia de la cual este electrón ejerce una fuerte repulsión electrostática sobre la primera capa. El segundo aspecto relevante es que mientras las bandas de emisión (ubicadas a la izquierda en el gráfico) de las matrices de Ne y Ar están desplazadas hacia el azul, la del sólido de para-hidrógeno está ligeramente desplazada hacia el rojo (es menos energética) con respecto a su valor para el NO en la fase gaseosa. Esto indica que en los casos de los sólidos de Ne y de Ar, la molécula dopante todavía se encuentra comprimida por los átomos de gases nobles de la primera capa cuando ocurre la fluorescencia, puesto que el resto del cristal ofrece resistencia a la expansión adicional de los vecinos más próximos a la impureza. En la nueva posición de equilibrio, correspondiente al estado excitado, todavía existe una interacción repulsiva entre la molécula y los átomos que la rodean. En el caso del para-hidrógeno, la cavidad es tan grande en la nueva configuración de equilibrio, que no existe prácticamente interacción entre la molécula y su entorno. Esto es consecuencia de la menor rigidez del cristal de para- H_2 , comparado con el de Ne y el de Ar. La matriz de Ne presenta

el mayor corrimiento de Stokes, lo que indica que para este sistema es mayor la magnitud de la reestructuración inducida por la fotoexcitación de la impureza.

Los espectros de absorción y emisión y la dinámica de relajación de matrices de gases nobles dopadas, a partir de la excitación electrónica de una impureza de NO a su primer estado de Rydberg, ha sido investigada a través de simulaciones con DMC, en las cuales se incorpora el efecto de la delocalización cuántica de las partículas a través de la CCAA [25,27,28,31,49,115,116]. Los resultados de estos estudios muestran que la reestructuración de cada uno de los sólidos de gases nobles está caracterizada por una expansión inicial de la capa formada por los vecinos más próximos a la molécula excitada, durante un intervalo de tiempo que varía en el rango 0.2-1.0 ps, seguida por oscilaciones de baja frecuencia fuertemente amortiguadas (como se muestra en la Figura 8). De acuerdo con estas simulaciones clásicas, el incremento relativo de las dimensiones de la burbuja electrónica es de alrededor de un 27% para el cristal de neón, mientras que para el resto de los sólidos esta variación corresponde, aproximadamente, al 8.4% (Ar), 5.7% (Kr) y 5% (Xe) del valor inicial del radio de la cavidad [116]. Para las matrices de argón y kriptón dopadas con NO, también se ha llevado a cabo el análisis de la densidad de estados vibracionales, a partir del cual se han identificado los modos dominantes en el mecanismo de relajación [25].

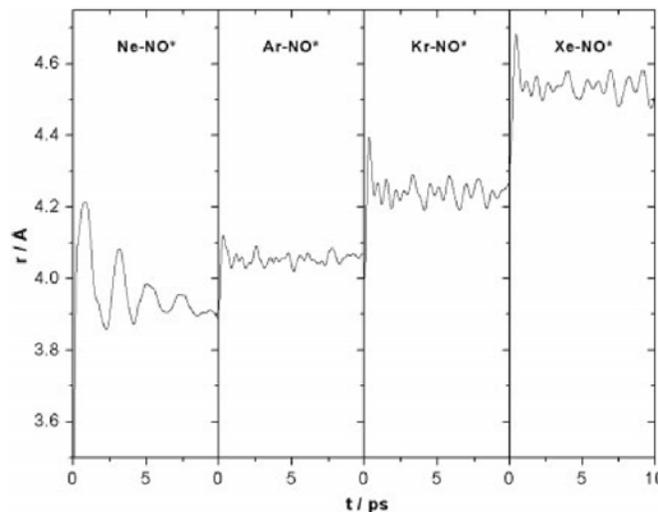


Figura 8. Evolución temporal del radio de la primera capa de vecinos de la impureza, a partir de la fotoexcitación del NO a su primer estado de Rydberg. Tomado de la Ref. [116].

A pesar de no obtenerse una correspondencia cuantitativa entre los resultados de las simulaciones con DMC y de los experimentos de espectroscopía de femtosegundos y estacionaria, estos trabajos permitieron mejorar la comprensión acerca de cuáles parámetros físicos determinan la respuesta estructural del sólido a la excitación electrónica de la impureza. En particular, fue posible dilucidar por qué la reorganización del sólido de neón ocurre más lentamente, comparada con el cristal de argón, a pesar de constituir un medio más ligero. Este hecho es consecuencia del mayor alcance, comparado con las distancias internucleares en el sólido de Ne, de la interacción repulsiva NO-Ne correspondiente al estado electrónico

excitado de la molécula diatómica. Tras la fotoexcitación, como resultado de su interacción con el electrón en el orbital de Rydberg, las tres primeras capas alrededor de la impureza son puestas en movimiento. El desplazamiento de estas primeras tres capas activa la transferencia de energía hacia el resto de los grados de libertad del sistema, lo que retrasa la expansión.

Las discrepancias entre los valores de las magnitudes calculadas y los datos experimentales reportados son más significativas en el caso de las matrices de neón, como consecuencia de la mayor influencia de la energía de punto cero sobre las propiedades estructurales y dinámicas de este sistema. Estudios posteriores han demostrado que la representación de los efectos de delocalización cuántica, a partir de la extensión de la CCAA al caso de potenciales anarmónicos, conduce a una mejor correspondencia entre los resultados de las simulaciones y las mediciones experimentales llevadas a cabo en matrices de neón dopadas con NO, como es el caso de los anchos de las bandas espectrales [42]. Adicionalmente, el análisis de las componentes de Fourier de la densidad de partículas revela que la corrección cuántica basada en la aproximación armónica de las oscilaciones de la red, no es capaz de reproducir la estructura del sólido de neón. Por otra parte, la respuesta dinámica del medio a la redistribución de la densidad electrónica en el soluto muestra una marcada dependencia de la estructura cristalográfica de la red, para cualquiera de los modelos utilizados con el objetivo de incorporar el efecto de las vibraciones de punto cero.

El papel notable jugado por los efectos cuánticos en este sistema, ha motivado el desarrollo de un modelo cuántico para describir la respuesta ultrarrápida de la matriz de neón [67]. El modelo describe el movimiento de aproximadamente 4000 átomos, cuyo desplazamiento está restringido a la dirección radial. Esta restricción se introduce sobre la base de la débil anisotropía de la interacción NO-Ne en el estado excitado. El Hamiltoniano resultante tiene 80 dimensiones y fue utilizado en la resolución numérica de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo dentro de la aproximación de Hartree, como se describe en la Sección IV. La propagación numérica del paquete de ondas multidimensional permite analizar tanto las deformaciones estáticas del sólido dopado como su respuesta dinámica a la fotoexcitación del NO.

Los desplazamientos radiales de los átomos de Ne que rodean la impureza, obtenidos a través del método de relajación y representados en la Figura 9, permiten cuantificar el efecto de la presencia de la impureza en el sólido. Se observa que este desplazamiento no es una función monótona de la distancia al origen de coordenadas, sino que presenta saltos bruscos o valores pronunciados de esta magnitud para algunas capas que no son contiguas (1, 4, 9b, ...). Este hecho se explica de la forma siguiente: la primera capa muestra el desplazamiento más importante con respecto a su valor en la matriz pura, de alrededor de 0.26 a.u. (4.5 % de su valor inicial), debido a que la componente repulsiva del potencial de interacción NO-Ne es dominante a la distancia a la que se encuentra esta primera

capa en el sólido de neón puro. A la distancia a la que se encuentra la segunda capa en el cristal (que es de alrededor de 8.13 a.u.), el potencial del NO-Ne es pequeño, pero atractivo, por lo que provoca una débil contracción de la misma. Para la tercera capa y todas las capas posteriores, la interacción NO-Ne es despreciable y los desplazamientos que ocurren se deben al movimiento de los átomos de Ne vecinos. Este fenómeno se vuelve especialmente importante para la cuarta capa: los átomos que la integran se encuentran a la menor distancia, la distancia de vecinos próximos, de los átomos de la primera capa. Luego, los átomos de la cuarta capa son desviados de su posición inicial (1.3 %) como consecuencia del desplazamiento de los átomos de la primera capa. De esta forma, cada uno de los átomos de la primera capa define una línea geométrica que parte de la impureza, sobre la cual los átomos de Ne se encuentran ubicados a la distancia de vecinos más próximos. La perturbación se propaga preferencialmente a lo largo de estas direcciones.

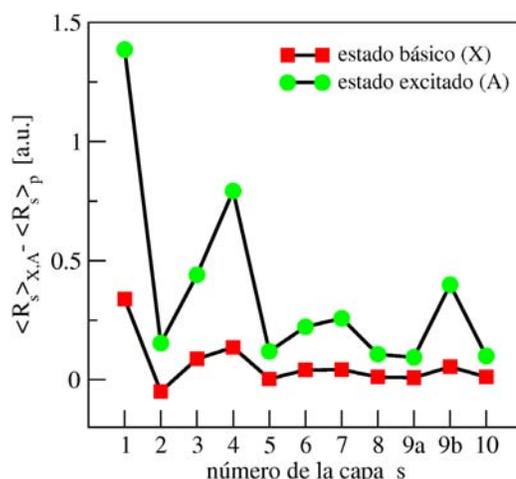


Figura 9. Valores medios R_s de los desplazamientos de las capas (con respecto a las posiciones de los átomos en el cristal puro), causados por la presencia de la impureza de NO en un sitio sustitucional de la matriz. Los cuadrados corresponden a cuando la impureza se encuentra en el estado básico y los círculos a cuando ésta se encuentra en su primer estado de Rydberg.

Para las capas donde sólo un subconjunto de átomos cae en estos ejes privilegiados, el desplazamiento de éstos es tratado de manera independiente al de la subcapa que no está conectada con estos ejes. Esto permite tomar en cuenta las grandes diferencias en los desplazamientos radiales colectivos debido a la presencia de la impureza. La importancia de este efecto estructural se visualiza claramente en la Figura 9, para las capas $s = 9a$ y $s = 9b$. Ambas tienen la misma distancia radial promedio en la matriz pura, mientras que, cuando la impureza está presente, sus desplazamientos relativos son notablemente diferentes. Los átomos de la capa 9b caen a lo largo de los ejes privilegiados y son desplazados, ante la presencia de la impureza, 0.05 a.u. con respecto a su posición en la matriz pura, mientras que los de la capa 9a permanecen prácticamente inafectados. Los desplazamientos medios de los átomos de Ne alrededor de la impureza, cuando ésta se encuentra en el estado excitado NO(A), confirman que la deformación principal ocurre para los átomos que yacen a lo

largo de los ejes cristalográficos (110).

A pesar de la reducción de la dimensionalidad, el modelo descrito permite no sólo realizar un tratamiento puramente cuántico, sino también incluir parámetros del pulso realistas. Se demostró que la dinámica presenta una fuerte dependencia de la duración temporal del pulso de excitación. Para el proceso dinámico se encontró que, en analogía con los resultados clásicos, la dinámica cuántica es un complejo proceso colectivo que involucra muchos átomos de la matriz, donde ocurre la propagación de la perturbación, a lo largo de la dirección cristalográfica definida por los primeros vecinos de la impureza, con las características de una onda de choque. Los átomos ubicados desfavorablemente con respecto a este eje cristalográfico, incluso si se encuentran próximos al centro de la impureza, permanecen prácticamente sin afectación y forman un “baño” hacia donde se disipa la energía. La propagación supersónica de la perturbación, fundamentalmente a lo largo del eje cristalográfico privilegiado, y la existencia de un “baño” hacia donde la energía es disipada, constituyen los mecanismos fundamentales de redistribución de la energía depositada por el láser entre los distintos grados de libertad del sólido. Ambos procesos están caracterizados por valores marcadamente distintos de la potencia disipada: $\sim 9.7 \text{ cm}^{-1}/\text{fs}$ y $\sim 0.7 \text{ cm}^{-1}/\text{fs}$, respectivamente.

Uno de los efectos dinámicos principales es la expansión de la cavidad formada por los átomos que circundan a la impureza en una escala de tiempo ultrarrápida de alrededor de 150 fs. Como los anchos de los pulsos utilizados en los experimentos son del mismo orden que la escala de tiempo del proceso dinámico, el proceso de bombeo no puede considerarse instantáneo. Esta circunstancia da lugar a la interferencia entre los paquetes de onda promovidos al estado excitado bajo la influencia del láser en instantes de tiempo distintos, situación que sólo puede ser descrita correctamente dentro del marco de la mecánica cuántica. Como consecuencia, el tratamiento cuántico permitió no sólo evaluar el efecto de la duración de los pulsos electromagnéticos, sino también usar los parámetros exactos del experimento para simular las señales de bombeo-sonda. Esta circunstancia permitió llevar a cabo, por primera vez, la comparación de los observables calculados con las señales determinadas directamente en el experimento (espectros de absorción dinámica), en lugar de realizar la comparación con magnitudes inferidas a partir de estas mediciones. Las señales simuladas se corresponden cualitativamente con los resultados experimentales (Figura 10), mostrando claramente la formación ultrarrápida de la burbuja, su contracción alrededor de 1 ps después de la fotoexcitación y su dinámica de relajación subsecuente debido al acoplamiento con otras capas.

La Figura 10 refleja una característica fundamental de la espectroscopía de bombeo-sonda: cada longitud de onda λ del pulso de sondeo define ciertas configuraciones geométricas R_i^* , de los átomos de la matriz, para las cuales la frecuencia del pulso láser satisface la condición de resonancia con la diferencia de energías entre los estados inicial y final. Estos son los llamados puntos dinámicos de Franck-Condon. Cuando

el paquete de ondas pasa por estos puntos, la transición hacia estados de energía superiores es favorecida y la señal medida, que es proporcional a la población de los estados que se excitan con el pulso, se incrementa apreciablemente. Como el ancho temporal del pulso es finito, esta señal se distribuye a lo largo del intervalo temporal del pulso. Esto permite establecer una correspondencia entre el movimiento del paquete de ondas asociado a la primera capa con una señal que se puede detectar experimentalmente.

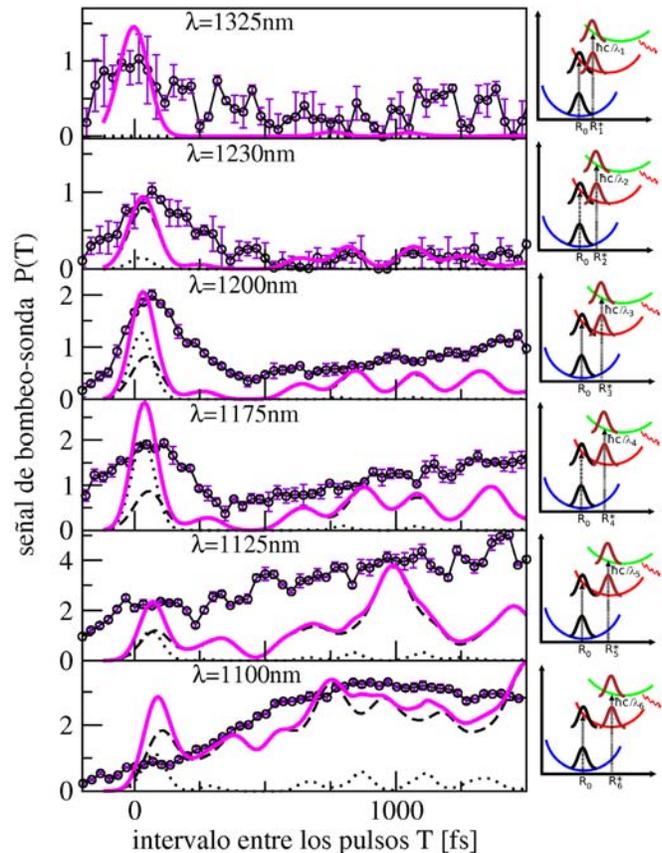


Figura 10. Espectros de absorción dinámica $P(T)$ (líneas continuas), en función del tiempo de retardo T entre los pulsos de bombeo y sonda. Las líneas discontinuas y punteadas representan las contribuciones debidas a las transiciones a los estados electrónicos C y D, respectivamente. Los círculos con barras de errores indican los valores experimentales (Ref. [26]). A la derecha se ilustran las configuraciones para las cuales el pulso de sondeo induce la transiciones $A \rightarrow C$ o $A \rightarrow D$.

La principal diferencia de las simulaciones llevadas a cabo a través de la propagación de paquetes de ondas, con respecto a las señales medidas, es que los resultados teóricos muestran un perfil mucho más estructurado. Este comportamiento es consecuencia de la utilización de la aproximación de Hartree dependiente del tiempo, como han demostrado estudios más recientes que incorporan explícitamente las correlaciones dinámicas entre los distintos grados de libertad del sistema [117]. La inclusión de estas correlaciones conduce al suavizamiento de los espectros simulados, mejorando la correspondencia con los resultados experimentales. La aproximación radial inherente al tratamiento descrito, sin embargo, no conduce a desviaciones significativas de los principales observables calculados, con respecto a la

solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo teniendo en cuenta todos los grados de libertad del sistema [118].

VI. FOTODISOCIACIÓN Y RECOMBINACIÓN DE DIHALÓGENOS

La fotodisociación de moléculas simples, embebidas en matrices de gases nobles, constituye uno de los ejemplos paradigmáticos de fenómenos donde la presencia del entorno puede influir críticamente sobre el resultado del proceso. En este sentido, el comportamiento dinámico de moléculas diatómicas formadas por halógenos y su respuesta a la fotoexcitación, han sido objeto de estudio por parte de numerosos grupos de investigación [9-16,119-123,128].

Consideremos una molécula diatómica que pasa, como consecuencia de la absorción de un fotón, a un estado electrónico excitado donde la energía potencial de interacción es repulsiva para todas las posibles distancias entre ambos núcleos. En fase gaseosa, semejante proceso conduce inevitablemente a la disociación de la molécula. Sin embargo, si la molécula se inserta dentro de un sólido, el mecanismo de fotodisociación depende sensiblemente de la energía de la barrera de potencial que crean los átomos alrededor de la impureza. Esta barrera de potencial restringe, al menos temporalmente, el movimiento de la molécula a la cavidad que forman los átomos del sólido correspondientes a la primera capa de vecinos próximos. Este fenómeno se conoce como efecto jaula y es el responsable de la riqueza fenomenológica del proceso de fotodisociación en fase condensada, relacionada con las distintas alternativas para atravesar la barrera. A continuación nos centraremos en dos de los fenómenos (la recombinación y la fotodisociación retardada), que tienen lugar tras la fotoexcitación de la molécula a un estado disociativo, como consecuencia del efecto jaula.

Para cada uno de los fotofragmentos, las zonas ocupadas por los núcleos de los átomos de la capa de vecinos próximos constituyen barreras de potencial infinitas. Sin embargo, las regiones intermedias entre dos de estos átomos corresponden a barreras de potencial de altura finita. Las zonas donde la barrera de potencial es menor que la energía cinética del fotofragmento se consideran como *ventanas* de la jaula, mientras que el resto de las zonas de la capa se consideran como las *paredes* de la jaula. En los sólidos de gases nobles, las ventanas de la jaula existen sólo para el fotofragmento “más pequeño”, donde el tamaño efectivo de estos productos de la disociación está determinado por el potencial de interacción del fragmento con los átomos de gases nobles. Incluso en el caso de los halógenos más pequeños, estas ventanas constituyen una fracción muy pequeña del área total de la primera esfera de coordinación. La fotodisociación retardada es el proceso en el cual el fotofragmento abre su propia ventana a través de la transferencia de momentum lineal a los átomos de la primera capa y la deformación de la estructura de la jaula. El fragmento debe transferirle suficiente energía a los átomos que forman la jaula para abrir la ventana. En otras palabras, el átomo de halógeno

debe ceder suficiente energía para modificar apreciablemente la configuración de la primera capa y con esto disminuir la barrera de potencial de la jaula, conservando al mismo tiempo energía cinética suficiente para atravesarla. Es evidente que este proceso requiere un alto grado de sincronización entre las colisiones y las correlaciones de los movimientos atómicos. Típicamente, este proceso es mucho más lento que la fotodisociación de la molécula en fase gaseosa. La estrecha interrelación existente entre el movimiento intramolecular con respecto a la dinámica de reorganización del medio circundante, ha estimulado un número significativo de estudios acerca de las propiedades fundamentales de los procesos de decoherencia en un sistema cuántico (la molécula diatómica) como consecuencia de la interacción con un cuerpo “macroscópico” (el entorno cristalino) [17,124-127]. Los resultados de estos estudios han facilitado la comprensión del fenómeno de decoherencia en sistemas multidimensionales y han abierto nuevas perspectivas al control coherente de estos fenómenos.

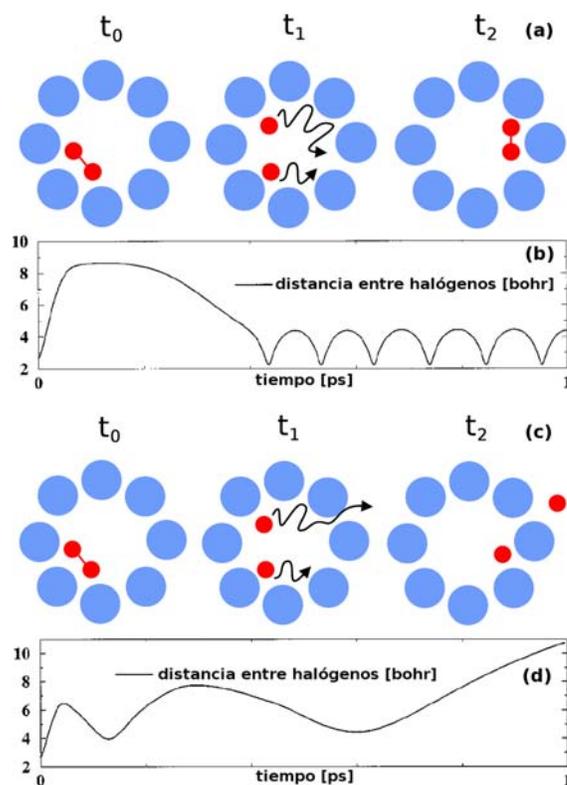


Figura 11. Representación esquemática del mecanismo y variación temporal de la distancia entre los halógenos en los procesos de recombinación (paneles (a) y (b)) y fotodisociación retardada (paneles (c) y (d)).

Por otra parte, el proceso de recombinación por efecto jaula es el resultado más probable en los estudios de fotodisociación en matrices de gases nobles, cuando se utilizan fuentes de luz estándares (láseres de ArF de energía $\hbar\omega = 6.5 \text{ eV}$). Esto ocurre porque para la mayoría de los fotofragmentos, la altura de la barrera de la jaula es mayor que 2 eV , y las energías de enlace moleculares son típicamente del orden de $2 - 4 \text{ eV}$. Adicionalmente, si la energía en exceso no es suficiente para provocar la fotodisociación inmediata de la molécula, para los fotofragmentos de masa comparable con la de los átomos de la matriz, rápidamente comienzan a ocurrir transferencias de

momentum y disipación de la energía en el medio, de forma que usualmente no ocurre la fotodisociación retardada y los fragmentos se recombinan finalmente.

En la Figura 11 se observan los esquemas de estos dos procesos (paneles (a) y (c)), donde, en dependencia de la cantidad de energía que se le entregue a la molécula diatómica ésta se disociará y uno de los fragmentos logrará atravesar la barrera de potencial de la jaula (a) o, de lo contrario, ocurrirá eventualmente la recombinación de los fragmentos dentro de la cavidad. En los paneles (b) y (d) se muestran los comportamientos de las distancias entre los halógenos correspondientes a los procesos (a) y (c) respectivamente. Los datos corresponden al proceso de fotoexcitación de una molécula F_2 en argón sólido [14]. En el panel (b) se observa claramente que la molécula llega a disociarse y producto de las colisiones con los átomos de la jaula, los fragmentos ceden su energía en exceso y se recombinan. El patrón oscilatorio de la distancia entre los halógenos se restablece al cabo de alrededor de 0.4 ps después de la fotoexcitación. En el panel (d) se muestra el caso de fotodisociación retardada, donde uno de los fragmentos se mantiene dentro de la jaula un tiempo relativamente largo efectuando colisiones con los átomos de la jaula y luego logra crear una ventana y atravesar la barrera entre dos átomos de la capa. La disociación completa tiene lugar transcurridos alrededor de 0.8 ps .

VII. CONCLUSIONES

El estudio de la dinámica del reordenamiento geométrico de las matrices de gases nobles dopadas con impurezas atómicas y moleculares ha adquirido, a lo largo de las dos últimas décadas, una sólida posición como herramienta para la investigación de las propiedades estructurales y dinámicas de los sistemas moleculares. Los ejemplos citados ilustran las contribuciones realizadas por este tipo de investigaciones al conocimiento de las características fundamentales de los procesos moleculares que ocurren en fase condensada. A pesar de su relativa madurez, las posibilidades ofrecidas por este campo no están agotadas y continuamente se abren nuevos horizontes para la exploración de los procesos dinámicos a escala atómica y molecular, a partir de la correlación existente entre la evolución dinámica del entorno y el estado de la molécula objeto de estudio. Estas perspectivas están relacionadas con el desarrollo de las técnicas de espectroscopía ultrarrápida, fundamentalmente la extensión a nuevas escalas temporales (attosegundos) y energéticas (a partir de la incorporación, a la espectroscopía en el dominio temporal, de otras regiones del espectro electromagnético, como los rayos X). En este sentido, puede preverse que el análisis de la relajación estructural fotoinducida jugará, en los años venideros, un papel fundamental en la investigación de la dinámica de los procesos no adiabáticos, los efectos de coherencia cuántica que se derivan de la creación de paquetes de ondas vibracionales por pulsos de duración temporal finita, entre otros fenómenos.

Por otra parte, es importante resaltar que en este campo existe

una compenetración ejemplar entre la teoría y el experimento. De forma concatenada, los hallazgos experimentales han sentado las bases para el desarrollo de las herramientas de modelación teórica. Éstas, a su vez, han permitido analizar la información experimental de forma que de ella se derive una comprensión profunda de los mecanismos microscópicos que determinan la evolución dinámica de los fenómenos a esta escala. La modelación teórica juega un papel importante en la evaluación de la influencia de las interacciones intermoleculares sobre la evolución temporal de los procesos dinámicos, y en la traducción de las mediciones llevadas a cabo en estos sistemas en una representación explícita del movimiento nuclear.

Los métodos teóricos empleados para la simulación computacional de estos sistemas físicos han evolucionado hasta volverse tan sofisticados, que es posible, actualmente, realizar la comparación directa de los resultados obtenidos por esta vía con los datos experimentales. Este nivel de precisión, alcanzable desde hace varias décadas por los métodos de simulación para sistemas clásicos, era desconocido hasta el momento para los sistemas moleculares con efectos cuánticos pronunciados. En particular, el tratamiento cuántico de la dinámica de relajación de matrices de neón dopadas con monóxido de nitrógeno, a partir de la fotoexcitación del primer estado de Rydberg de la impureza, constituye el primer estudio reportado en la literatura donde se resuelve explícitamente la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para encontrar la evolución temporal de la función de onda de muchos cuerpos de un sistema molecular en fase condensada, utilizando una descripción realista de las interacciones intermoleculares. Los escasos estudios previos sobre la dinámica cuántica de sistemas moleculares con varias decenas de grados de libertad utilizaban potenciales de interacción bastante simplificados. Se espera que el modelo propuesto, así como los resultados obtenidos en esta investigación, generen desarrollos ulteriores en áreas afines, relacionadas con la simulación computacional de sistemas cuánticos en fase condensada.

-
- [1] M. M. Martin, J. T. Hynes (eds.), *Femtochemistry and Femtobiology*, 1ra Ed. (Elsevier B. V., Amsterdam, 2004).
 - [2] A. H. Zewail, *J. Phys. Chem. A* **104**, 5660 (2000).
 - [3] R. G. W. Norrish, G. Porter, *Nature* **164**, 658 (1949).
 - [4] M. Eigen, *Discuss. Faraday Soc.* **17**, 194 (1954).
 - [5] F. J. McClung, R. W. Hellwarth, *J. Appl. Phys.* **33**, 828 (1962).
 - [6] A. J. De Maria, D. A. Stetser, H. Heynau, *Appl. Phys. Lett.* **8**, 174 (1966).
 - [7] R. L. Fork, C. H. Brito Cruz, P. C. Becker, C. V. Shank, *Opt. Lett.* **12**, 483 (1987).
 - [8] D. E. Spence, P. N. Kean, W. Sibbett, *Opt. Lett.* **16**, 42 (1991).
 - [9] V. A. Apkarian, N. Schwentner, *Chem. Rev.* **99**, 1481 (1999).
 - [10] P. Jungwirth, R. B. Gerber, *Chem. Rev.* **99**, 1583 (1999).
 - [11] A. Accardi, A. Borowski, O. Kühn, *J. Phys. Chem. A* **113**, 7491 (2009).
 - [12] M. Bargheer, A. Cohen, R. B. Gerber, M. Gühr,

- M. V. Korolkov, J. Manz, M. Y. Niv, M. Schröder, N. Schwentner, *J. Phys. Chem. A* **111**, 9573 (2007).
- [13] H. Eshet, M. A. Ratner, R. B. Gerber, *Chem. Phys. Lett.* **431**, 199 (2006).
- [14] M. Y. Niv, M. Bargheer, R. B. Gerber, *J. Chem. Phys.* **113**, 6660 (2000).
- [15] M. Bargheer, M. Y. Niv, R. B. Gerber, N. Schwentner, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 108301 (2002).
- [16] M. Gühr, M. Bargheer, M. Fushitani, T. Kiljunen, N. Schwentner, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **9**, 779 (2007).
- [17] M. Gühr, H. Ibrahim, N. Schwentner, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **6**, 5353 (2004).
- [18] M. Gühr, M. Bargheer, N. Schwentner, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 085504 (2003).
- [19] M. Fushitani, N. Schwentner, M. Schröder, O. Kühn, *J. Chem. Phys.* **124**, 024505 (2006).
- [20] O. Kühn, L. Wöste (eds.), *Coherence and Control of Molecular Dynamics in Rare Gas Matrices*, Vol. 87, (Springer Verlag, Heidelberg, Alemania, 2007).
- [21] M. Fushitani, M. Bargheer, M. Gühr, H. Ibrahim, N. Schwentner, *J. Phys. B* **41**, 074013 (2008).
- [22] M. Bargheer, R. B. Gerber, M. V. Korolkov, O. Kühn, J. Manz, M. Schröder, N. Schwentner, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **4**, 5554 (2002).
- [23] C. Jeannin, M. T. Portella-Oberli, S. Jimenez, F. Vigliotti, B. Lang, M. Chergui, *Chem. Phys. Lett.* **316**, 51 (2000).
- [24] S. Jimenez, A. Pasquarello, R. Car, M. Chergui, *Chem. Phys.* **233**, 343 (1998).
- [25] S. Jimenez, M. Chergui, G. Rojas-Lorenzo, J. Rubayo-Soneira, *J. Chem. Phys.* **114**, 5264 (2001).
- [26] F. Vigliotti, L. Bonacina, M. Chergui, *Phys. Rev. B* **67**, 115118 (2003).
- [27] G. Rojas-Lorenzo, J. Rubayo-Soneira, F. Vigliotti, M. Chergui, *Phys. Rev. B* **67**, 115119 (2003).
- [28] F. Vigliotti, L. Bonacina, M. Chergui, G. Rojas-Lorenzo, J. Rubayo-Soneira, *Chem. Phys. Lett.* **362**, 31 (2002).
- [29] C. Jeannin, M. T. Portella-Oberli, F. Vigliotti, M. Chergui, *Chem. Phys. Lett.* **279**, 65 (1997).
- [30] F. Vigliotti, A. Cavina, C. Bressler, B. Lang, M. Chergui, *J. Chem. Phys.* **116**, 4542 (2002).
- [31] L. Bonacina, P. Larrégaray, F. van Mourik, M. Chergui, *J. Chem. Phys.* **125**, 054507 (2006).
- [32] F. Vigliotti, L. Bonacina, M. Chergui, *J. Chem. Phys.* **116**, 4553 (2002).
- [33] F. Vigliotti, E. Sarraf, M. Chergui, R. Scholz, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2355 (1999).
- [34] S. A. Egorov, P. Larrégaray, *J. Chem. Phys.* **128**, 244502 (2008).
- [35] D. Micha, I. Burghardt (eds.), *Quantum Dynamics of Complex Molecular Systems* (Springer, Nueva York, Estados Unidos, 2007).
- [36] H. D. Meyer, U. Manthe, L. S. Cederbaum, *Chem. Phys. Lett.* **165**, 73 (1990).
- [37] U. Manthe, H. D. Meyer, L. S. Cederbaum, *J. Chem. Phys.* **97**, 3199 (1992).
- [38] M. H. Beck, A. Jäckle, G. A. Worth, H. D. Meyer, *Phys. Rep.* **324**, 1 (2000).
- [39] H. D. Meyer, F. Gatti, G. A. Worth (eds.), *Multidimensional Quantum Dynamics: MCTDH Theory and Applications* (Wiley-VCH, Weinheim, 2009).
- [40] J. P. Hansen, I. R. McDonald, *Theory of Simple Liquids* (Academic Press, London, 1986).
- [41] M. Sterling, Z. Li, V. A. Apkarian, *J. Chem. Phys.* **103**, 5679 (1995).
- [42] L. Uranga-Piña, A. Martínez-Mesa, L. Garcia-Reyes, J. Rubayo-Soneira, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **11**, 5358 (2009).
- [43] J. P. Bergsma, P. H. Berens, K. R. Wilson, D. R. Fredkin, E. J. Heller, *J. Phys. Chem.* **88**, 612 (1984).
- [44] J. C. Owrutsky, D. Raftery, R. M. Hochstrasser, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **45**, 519 (1994).
- [45] D. W. Miller, S. A. Adelman, *Int. Rev. Phys. Chem.* **13**, 359 (1994).
- [46] M. Gühr, M. Bargheer, M. Fushitani, T. Kiljunen, N. Schwentner, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **9**, 779 (2007).
- [47] M. D. Morse, *Chem. Rev.* **86**, 1049 (1986).
- [48] D. M. Ceperley, *Rev. Mod. Phys.* **67**, 279 (1995).
- [49] J. C. Castro-Palacio, K. Ishii, F. Ayala-Mató, J. Rubayo-Soneira, K. Yamashita, *J. Phys. Chem. A* **114**, 9673 (2010).
- [50] P. E. Martínez Fernández, J. Rubayo Soneira, G. Rojas Lorenzo, *Rev. Cub. Fis.* **23**, 116 (2006).
- [51] P. Pajón-Suárez, G. Rojas-Lorenzo, J. Rubayo-Soneira, R. Hernández-Lamonedá, *Chem. Phys. Lett.* **421**, 389 (2006).
- [52] J. C. Castro-Palacio, J. Rubayo-Soneira, K. Ishii, K. Yamashita, *J. Chem. Phys.* **126**, 134315 (2007).
- [53] J. C. Castro Palacio, L. Velazquez Abad, A. Lombardi, V. Aquilanti, J. Rubayo-Soneira, *J. Chem. Phys.* **126**, 174701 (2007).
- [54] P. Pajón-Suárez, G. A. Rojas-Lorenzo, J. Rubayo-Soneira, R. Hernández-Lamonedá, P. Larrégaray, *J. Phys. Chem. A* **113**, 14399 (2009).
- [55] J. A. Barker, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 230 (1986).
- [56] K. Rosciszewski, B. Paulus, *Phys. Rev. B* **66**, 092102 (2002).
- [57] S. B. Huh, J. S. Lee, *J. Phys. Chem. A* **106**, 10606 (2002).
- [58] N. D. Drummond, R. J. Needs, *Phys. Rev. B* **73**, 024107 (2000).
- [59] P. Schwerdtfeger, A. Hermann, *Phys. Rev. B* **80**, 064106 (2009).
- [60] P. Schwerdtfeger, B. Assadollahzadeh, *Phys. Rev. B* **82**, 205111 (2010).
- [61] W. C. Swope, H. C. Andersen, P. H. Berens, K. R. Wilson, *J. Chem. Phys.* **76**, 637 (1982).
- [62] M. P. Allen, D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Clarendon Press, Oxford, 1987).
- [63] F. G. Amar, B. J. Berne, *J. Phys. Chem.* **88**, 6720 (1984).
- [64] E. D. Potter, Q. Liu, A. H. Zewail, *Chem. Phys. Lett.* **200**, 605 (1992).
- [65] R. Jimenez, G. R. Fleming, P. V. Kumar, M. Maroncelli, *Nature (London)* **369**, 471 (1994).
- [66] M. Rosenblit, J. Jortner, *J. Phys. Chem. A* **101**, 751 (1997).
- [67] Ll. Uranga-Piña, C. Meier, J. Rubayo-Soneira, *J. Chem. Phys.* **135**, 164504 (2011).
- [68] R. Ramírez, C. P. Herrero, *Phys. Rev. B* **72**, 024303 (2005).
- [69] C. Cazorla, J. Boronat, *Phys. Rev. B* **77**, 024310 (2008).

- [70] Ll. Uranga-Piña, A. Martínez-Mesa, J. Rubayo-Soneira, G. Rojas-Lorenzo. *Chem. Phys. Lett.* **429**, 450 (2006).
- [71] R. Kosloff, H. Tal-Ezer, *Chem. Phys. Lett.* **127**, 223 (1986).
- [72] N. Schwentner, E. E. Koch, J. Jortner, *Electronic Excitations in Condensed Rare Gases* (Springer, Berlin, 1985).
- [73] E. Boursey, M. C. Castex, V. Chandrasekharan, *Phys. Rev. B* **16**, 2858 (1977).
- [74] I. Ya. Fugol, *Adv. Phys.* **37**, 1 (1988).
- [75] F. Coletti, J. M. Debever, G. Zimmerer, *J. Chem. Phys.* **83**, 49 (1985).
- [76] T. Kloiber, W. Laasch, G. Zimmerer, F. Coletti, J. M. Debever, *Europhys. Lett.* **7**, 77 (1988).
- [77] G. Zimmerer, en *Excited-State Spectroscopy in Solids* (Soc. Italiana di Fisica, Bologna, 1987), p. 37.
- [78] T. Suemoto, H. Kanzaki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **50**, 3664 (1981).
- [79] C. H. Leung, L. Emery, K. S. Song, *Phys. Rev. B* **28**, 3474 (1983).
- [80] K. Inoue, H. Sakamoto, H. Kanzaki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **53**, 819 (1984).
- [81] F. V. Kusmartsev, E. I. Rashba, *Czech. J. Phys., Sect. B* **32**, 54 (1982).
- [82] S. Ossicini, *J. Phys. Chem. Solids* **46**, 123 (1985).
- [83] P. L. Kunsch, F. Coletti, *J. Chem. Phys.* **70**, 726 (1978).
- [84] M. Derbyshire, R. D. Eters, *J. Chem. Phys.* **79**, 831 (1983).
- [85] M. Chergui, N. Schwentner, W. Bohmer, *J. Chem. Phys.* **85**, 2472 (1986).
- [86] M. Chergui, N. Schwentner, V. Chandrasekharan, *J. Chem. Phys.* **89**, 1277 (1988).
- [87] F. Vigliotti, M. Chergui, *Chem. Phys. Lett.* **296**, 316 (1998); **305**, 187 (1999).
- [88] N. Runeberg, M. Petterson, L. Khriachtchev, J. Lundell, M. Rasanen, *J. Chem. Phys.* **114**, 836 (2001).
- [89] J. Vigue, *Phys. Rev. A* **52**, 3973 (1995).
- [90] M. E. Fajardo, P. G. Carrick, J. W. Kenney III, *J. Chem. Phys.* **94**, 5812 (1991).
- [91] S. Tam, M. E. Fajardo, *J. Chem. Phys.* **99**, 854 (1993).
- [92] J. A. Boatz, M. E. Fajardo, *J. Chem. Phys.* **101**, 3472 (1994).
- [93] E. Cheng, K. B. Whaley, *J. Chem. Phys.* **104**, 3155 (1996).
- [94] Y. M. Ma, T. Cui, G. T. Zou, *Chem. Phys. Lett.* **343**, 604 (2001).
- [95] Y. M. Ma, T. Cui, G. T. Zou, *J. Chem. Phys.* **114**, 3092 (2001).
- [96] Y. M. Ma, T. Cui, G. T. Zou, *J. Low Temp. Phys.* **124**, 587 (2001).
- [97] A. Martínez-Mesa, Ll. Uranga-Piña, G. Rojas-Lorenzo, J. Rubayo-Soneira, *Chem. Phys. Lett.* **426**, 318 (2006).
- [98] M. Ryan, M. Collier, P. de Pujo, C. Crépin, J. G. McCaffrey, *J. Phys. Chem. A* **114**, 3011 (2010).
- [99] S. Lecoultra, A. Rydlo, C. Félix, W. Harbich, *Eur. Phys. J. D* **52**, 187 (2009).
- [100] S. Fedrigo, W. Harbich, J. Buttet, *Int. J. Mod. Phys. B* **6**, 3767 (1992).
- [101] S. Fedrigo, W. Harbich, J. Buttet, *J. Chem. Phys.* **99**, 5712 (1993).
- [102] W. Harbich, S. Fedrigo, J. Buttet, *J. Chem. Phys.* **96**, 8104 (1992).
- [103] S. L. Fiedler, K. J. Vaskonen, J. M. Eloranta, H. M. Kunttu, *J. Phys. Chem. A* **109**, 4512 (2005).
- [104] E. M. S. Macôas, L. Khriachtchev, M. Petterson, R. Fausto, M. Räsänen, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **7**, 743 (2005).
- [105] E. Popov, T. Kiljunen, H. Kunttu y J. Eloranta, *J. Chem. Phys.* **126**, 134504 (2007).
- [106] T. Kiljunen, E. Popov, H. Kunttu y J. Eloranta, *J. Chem. Phys.* **130**, 164504 (2009).
- [107] M. Turowski, C. Crépin, M. Gronowski, J. C. Guillemin, A. Coupeaud, I. Couturier-Tamburelli, N. Piétri y R. Kolos, *J. Chem. Phys.* **133**, 074310 (2010).
- [108] A. Olbert-Majkut, J. Ahokas, J. Lundell y Mika Petterson, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12**, 7138 (2010).
- [109] F. Ito, *J. Chem. Phys.* **128**, 114310 (2008).
- [110] V. Botan y P. Hamm, *J. Chem. Phys.* **129**, 044507 (2008).
- [111] H. Tanskanen, L. Khriachtchev, J. Lundell y M. Räsänen, *J. Chem. Phys.* **125**, 074501 (2006).
- [112] F. Fehrer, P. M. Dinh, E. Suraud y P. G. Reinhard, *Phys. Rev. B* **75**, 235418 (2007).
- [113] J. Ree, Y. H. Kim y H. K. Shin, *J. Chem. Phys.* **130**, 014507 (2009).
- [114] L. C. Ferreira, A.C. Cataneo, *Sci. Agric. (Piracicaba, Braz.)* **67**, 236 (2010).
- [115] J. C. Castro-Palacios, L. Velazquez, G. Rojas Lorenzo, J. Rubayo-Soneira, *Eur. Phys. J. D* **25**, 149 (2003).
- [116] J. Rubayo-Soneira, J. C. Castro-Palacios, G. Rojas-Lorenzo, *Phys. Stat. Sol. B* **242**, 1747 (2005).
- [117] L. Uranga-Piña, C. Meier, J. Rubayo-Soneira, *Chem. Phys. Lett.* **543**, 12 (2012).
- [118] W. Unn-Toc, L. Uranga-Piña, C. Meier, N. Halberstadt, J. Rubayo-Soneira, *J. Chem. Phys.* **137**, 054112 (2012).
- [119] D. W. Miller, S. A. Adelman, *J. Chem. Phys.* **117**, 2672 (2002).
- [120] H. Ibrahim, M. Gühr y N. Schwentner, *J. Chem. Phys.* **128**, 064504 (2008).
- [121] H. Ibrahim, M. Héjjas, M. Fushitani, N. Schwentner, *J. Phys. Chem. A* **113**, 7439 (2009).
- [122] T. Kiljunen, M. Bargheer, M. Guhr, N. Schwentner, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **6**, 2185 (2004).
- [123] A. Borowski, O. Kühn, *Theor. Chem. Acc.* **117**, 521 (2007).
- [124] M. Karavitis, T. Kumada, I. U. Goldschleger, V. A. Apkarian, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **7**, 791 (2005).
- [125] M. Wollenhaupt, V. Engel, T. Baumert, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **56**, 25 (2005).
- [126] M. Fushitani, M. Bargheer, M. Gühr, N. Schwentner, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **7**, 3143 (2005).
- [127] P. Nuernberger, G. Vogt, T. Brixner, G. Gerber, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **9**, 2470 (2007).
- [128] R. B. Gerber, M. V. Korolkov, J. Manz, M. Y. Niv, B. Schmidt, *Chem. Phys. Lett.* **327**, 76 (2000).
- [129] Y. Elran, P. Brumer, *J. Chem. Phys.* **121**, 2673 (2004).
- [130] T. D. Hone, Z. Izvekov, G. A. Voth, *J. Chem. Phys.* **122**, 054105 (2005).

50 AÑOS DE LICENCIATURA EN FÍSICA EN CUBA

50 YEARS OF DEGREE IN PHYSICS IN CUBA

O. DE MELO[†] Y M. SÁNCHEZ-COLINA

Facultad de Física, Universidad de La Habana. San Lázaro y L, Vedado. La Habana 10400, Cuba.
omelo@fisica.uh.cu[†]

[†] autor para la correspondencia.

Se hace un recuento, con énfasis en los últimos diez años, de los principales eventos relacionados con la carrera de Física en Cuba. Se analiza, para el caso de la Universidad de La Habana, la repercusión en la matrícula y el número de egresados de algunas políticas recientes como un nuevo sistema de ingreso, la apertura de la carrera de Ingeniería Física o el programa de duodécimo grado de preuniversitario en la Universidad. Al mismo tiempo se comentan los principales datos del programa cubano de posgrado en Física. Se realiza un análisis bibliométrico de la productividad científica de la Facultad a lo largo de la historia y se comentan los principales problemas y retos actuales.

We briefly survey the key events associated to Physics studies in Cuba, with emphasis in the last 10 years. We discuss, for the case of the University of Havana, the effects on the number of students entering and finishing the career, of some new policies –like a new admission system and the teaching of the 12th year of high school at the university. We show statistics of graduate studies in Physics, and some bibliometric data on the scientific productivity of the Physics Faculty, University of Havana. Finally, we briefly discuss the main issues and challenges faced by the Physics career in Cuba nowadays.

PACS: History of science, 01.65.+g; Science and government (funding, politics, etc.), 01.78.+p; Physics careers, 01.85.+f; Physics education, 01.40.-d

INTRODUCCIÓN

En este año 2012 se cumple medio siglo de la creación de la carrera de Física en Cuba, como parte de la labor seminal de la Reforma Universitaria de 1962. Más allá de la celebración en sí misma, toda conmemoración sugiere una revisión de lo hecho durante el período en cuestión. Este trabajo se propone contribuir a dicho análisis. En cierto modo es una actualización de otro publicado por uno de los autores 10 años atrás, cuando se celebraban 40 años del inicio de esta carrera [1].

Durante los últimos diez años han ocurrido algunos sucesos importantes relacionados con la carrera de Física. En el curso 2003-2004 se estableció en el país un nuevo sistema de ingreso para las carreras de Licenciatura en Física, Química y Matemática. Este sistema se introdujo como parte de un intento por mejorar tanto la calidad como la cantidad de los estudiantes de nuevo ingreso en estas especialidades y preveía la realización de un examen especial para seleccionar a aquellos que accederían a la carrera. Se esperaba, además, que resultara atractivo para los estudiantes con verdadera inclinación hacia la física que pudieran, gracias a este examen, tener garantizada la carrera con antelación al proceso de ingreso general. Transcurridos casi 10 años de su implantación y considerando que este sistema no continuará en el futuro, es oportuno tratar de evaluar su impacto en el desarrollo de la carrera.

En el verano de 2006 fue cerrado, con vistas a su reparación

capital, el edificio que sirvió de sede a la Facultad de Física de la Universidad de La Habana, incluyendo los laboratorios de investigación desde hace 44 años. Después de seis años, aún permanece en proceso de reconstrucción.

También durante este último decenio, transcurrió la breve vida de la carrera de Ingeniería Física, que luego de inaugurarse en las universidades de La Habana y Oriente en septiembre de 2007 a partir de una convocatoria del Ministerio de Educación Superior para la apertura de nuevas carreras, fue suprimida a apenas cinco años de vida, en 2011, por orientación del propio Ministerio. Esta carrera perseguía la formación de un ingeniero con amplios conocimientos de física y matemática. Estaba dirigida a las aplicaciones, y en su plan de estudio destacan como diferencia con la licenciatura una mayor presencia de la electrónica, la computación y la química a costa de una disminución en las horas dedicadas a la física teórica y a las matemáticas. La creación de esta carrera también constituyó un riesgo: la pobre matrícula de físicos podría dividirse en dos. Por otra parte representó un verdadero esfuerzo, sobre todo porque comenzó a funcionar en condiciones difíciles, ya con el edificio sede de la carrera cerrado por reparación.

En septiembre de 2007, se puso en práctica un nuevo plan de estudios, denominado Plan D. Por último en septiembre de 2010 ingresaron a la carrera los primeros estudiantes que hicieron sus estudios de duodécimo grado en la Universidad, a partir de un nuevo programa que había comenzado un año antes.

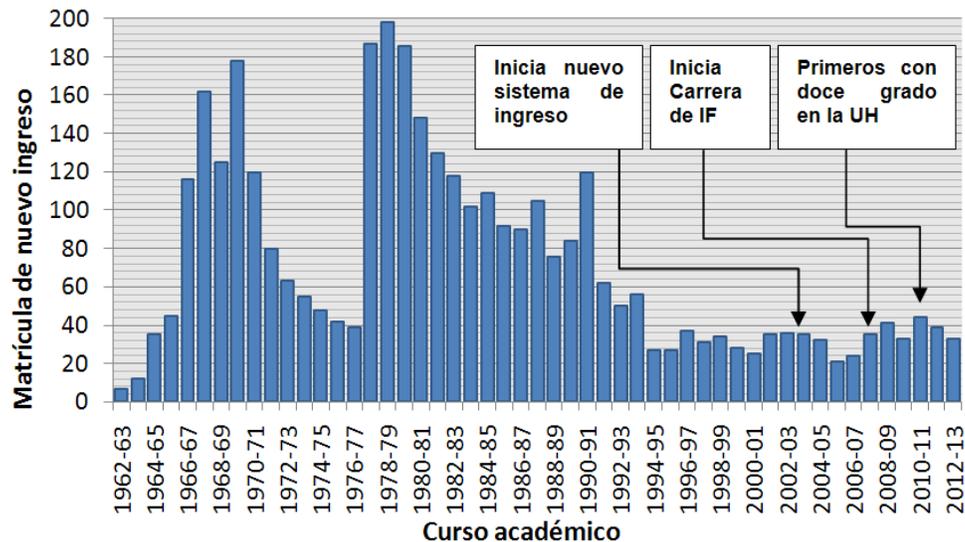


Figura 1. Comportamiento de la matrícula de nuevo ingreso a la carrera de Física en la Universidad de La Habana a lo largo de toda su historia. (Del curso 2007-2008 en adelante, el número reportado es la matrícula conjunta de las carreras de licenciatura en Física e Ingeniería Física). Se resaltan momentos importantes para el desarrollo de la carrera.

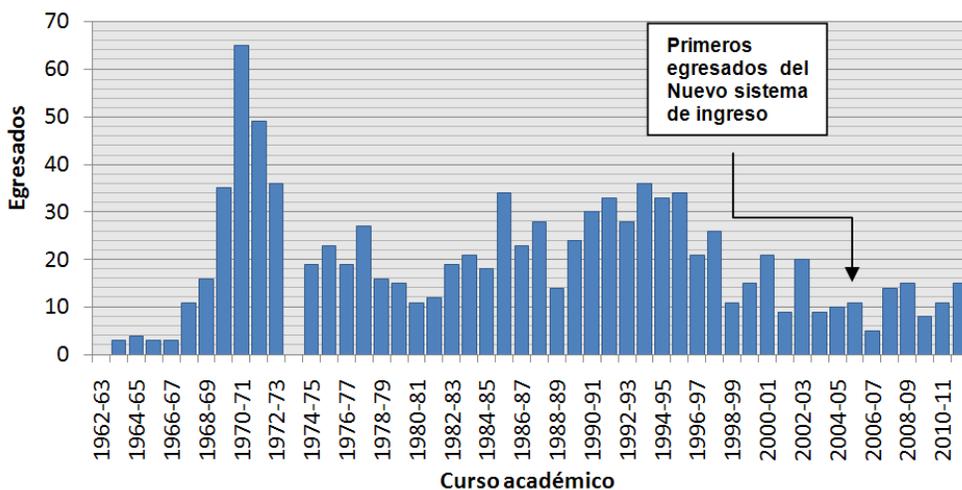


Figura 2. Número de egresados en cada curso escolar a lo largo de toda la historia de la carrera de Licenciatura en Física en la Universidad de La Habana.



Figura 3. Promoción relativa, consistente en el % de egresados 5 años después, con respecto a la matrícula del año en cuestión, en la Universidad de La Habana.

La licenciatura en Física existe hoy en Cuba en la Universidad de La Habana (donde se creó en 1962), en la Universidad de Oriente (desde 1970) y en la Universidad Central de las Villas (desde 2006, aunque ya había funcionado en la década del setenta por algún tiempo). El arsenal de físicos cubanos está formado también de unas decenas de graduados en el extranjero, fundamentalmente en la ex-Unión Soviética. También existe una carrera de Física Nuclear en el hoy Instituto de Ciencia y Tecnología Aplicadas (Instec). En sus 50 cincuenta años de existencia, 3647 estudiantes han matriculado la carrera de Física en la Universidad de La Habana. De ellos han egresado 956. Aunque los autores no cuentan con datos actualizados de otras universidades, el número total de graduados de la carrera en todo el país se pudiera estimar tomando en cuenta que en la Universidad de Oriente se han graduado algo menos de 500 estudiantes (334 hasta el 2000 [2]) y en Universidad Central de Las Villas una veintena (12 antes de 1976 [3]). Considerando estos datos aproximados, se pudiera estimar el número de egresados de la carrera en un valor cercano a los 1500.

En lo adelante, y considerando que en un número reciente de la Revista Cubana de Física se ha explorado la Física en el oriente del país en detalle [4,5] nos ocuparemos, fundamentalmente, de los estudios de licenciatura en Física en la Universidad de La Habana.

En la Fig. 1 se muestra el comportamiento de la matrícula de nuevo ingreso a lo largo de toda la historia de la carrera en la Universidad de La Habana.

Un comportamiento interesante que puede observarse en la Fig. 1 es el decrecimiento de las matrículas en el periodo 1970-76. Resulta extraño, ya que es precisamente a finales de los años 60 en que se suele situar el “despegue” de la física en Cuba [6]. Parece ser que este comportamiento se debe a múltiples factores. Una ubicación laboral en algunos casos poco deseable y el reconocimiento por los estudiantes de preuniversitario de un grado de dificultad elevado para aprobar la carrera de física pueden haber sido dos de estos factores. También, durante este periodo se reforzó la política de enviar estudiantes a estudiar física a los entonces países socialistas de Europa. Otros dos factores que pueden haber influido son: la apertura de la carrera de física en la Universidad de Las Villas y la decisión de limitar la fuente de ingreso a la Universidad de la Habana a estudiantes provenientes de preuniversitarios del occidente del país (el resto debían estudiar en la Universidad de Las Villas o la de Oriente). A mediados de los setenta las graduaciones de preuniversitario eran ya mucho más altas y se volvió a priorizar la Física en los planes de ingreso a la Universidad. Además, la colaboración con los países socialistas de entonces se inclinó más hacia el postgrado.

El incremento observado en el curso 1977-1978 coincide con una fuerte promoción del Estado hacia los estudios de física nuclear, y también con la coincidencia de dos años terminales

en el mismo curso en la enseñanza media superior. A partir de este curso, se observa un decrecimiento sistemático de las matrículas hasta una estabilización de entre 20 y 40 estudiantes a partir del curso 1994-1995.

Debido a que las matrículas son relativamente bajas, las fluctuaciones estadísticas son importantes, y no es sencilla la interpretación de los datos. Aun así, se puede concluir de esta figura que no se nota un incremento apreciable de la matrícula como consecuencia del nuevo sistema de ingreso a partir del curso 2003-2004. Tampoco se observa un crecimiento apreciable debido al inicio de la nueva carrera de Ingeniería Física o al del programa de doce grado en la Universidad de La Habana. Se pudiera especular que estas medidas, o alguna de ellas, jugaron un papel en detener un probable descenso de las matrículas (que se desprende, por ejemplo, de extrapolar linealmente la tendencia durante la década de los 80's en la Fig. 1) y mantener la estabilidad que se observa en el ingreso a la carrera durante los últimos 20 años.

En la Fig. 2 se reporta el número de egresados en cada curso académico. Tampoco aquí se observa directamente un cambio importante en el número de egresados como consecuencia del nuevo sistema de ingreso. Es difícil apreciar la influencia del establecimiento de la carrera de ingeniería física ya que solo se ha graduado su pequeña primera generación en la que solo ingresaron las mujeres. Un análisis más adecuado debería tomar en cuenta que el número de egresados de un determinado año está influenciado grandemente por la matrícula que lo generó. Por eso en la Fig. 3 se reporta el valor de la promoción de cada curso de ingreso, tomando en cuenta los egresados cinco años después (cuatro años en el periodo en que la carrera tuvo esta duración). Este valor debe, en principio, eliminar o al menos atenuar el efecto del tamaño de la matrícula inicial. Los altos valores de promoción observados en los cursos 63-64 y 65-66 son de poca significación estadística, ya que provienen de matrículas de menos de 5 estudiantes. Sin embargo, es notable que el decrecimiento continuado de matrícula desde el curso 1978-79 hasta su estabilización a inicios de los noventa, corresponda con un claro incremento de la promoción de estos cursos. La masividad en las matrículas de finales de los setenta, dio como resultado una menor eficiencia; los siguientes 15 años de decrecimiento de matrícula, condujeron más bien a un aumento del número de egresados, y a un incremento evidente de la promoción.

A fines de los noventa y principio de la década del 2000 parece notarse, a la par de algunas fluctuaciones, una tendencia al decrecimiento de la promoción a partir de una matrícula más o menos constante. Por último, a partir de los primeros egresados que ingresaron con el nuevo sistema de ingreso, parece estabilizarse la promoción, en un valor cercano o aproximadamente superior al promedio histórico (40 %).

Como una extensión natural de los estudios de licenciatura en la Universidad de La Habana, la Facultad de Física tiene un amplio y tradicional programa de posgrado. En la década

del setenta se inició un programa de maestría en Física en la Universidad de la Habana en el que se estima se hayan graduado unos 40 maestros en ciencias físicas; luego de un periodo de interrupción, se reiniciaron estos estudios en 1994. Desde entonces hasta la fecha se han completado siete ediciones con 162 graduados en áreas que incluyen la teoría de la materia condensada, la física de los dispositivos semiconductores, la preparación y caracterización de materiales y la física de los sistemas complejos. El programa, que se realiza conjuntamente con la Universidad de Oriente, ha sido acreditado como de Excelencia por la Junta Nacional de Acreditación en 2002 y en 2012.

Cuba posee un programa de doctorado en Física desde 1974. La Fig. 5 recoge la distribución de defensas de doctorado por año a partir de un diagnóstico del estado de la Física en Cuba (hasta 2001) realizado por el profesor Carlos Rodríguez-Castellanos y de datos del Tribunal Nacional de Grados Científicos (de 2001 a 2012). La cantidad de defensas recogida en estos datos es de 252. Hay que considerar que la mayoría de los trabajos de doctorado han requerido y requieren de una contribución apreciable de programas, instituciones y laboratorios de otros países.

LA INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA

Si hay algo que caracteriza a la carrera de física cubana, es la alta componente que la formación científica tiene en el plan de estudios. Existe una disciplina denominada Trabajo Científico, que comienza en segundo año con una asignatura llamada Práctica de Familiarización y termina en quinto año con un Trabajo de Diploma. En el último plan de estudios, instaurado en el curso 2007-2008, esta disciplina elevó su número de horas a 1054, que representa un 22 % del total de 4770 que contiene el plan. Esto implica que los estudiantes egresan con una buena formación en esta actividad tan importante para la profesión del físico.

En lo que sigue, se analizará la producción científica en Física, en el caso de la Universidad de La Habana. En la Fig. 4 se presentan los resultados de una búsqueda de artículos indexados en la base de datos SCOPUS en los que al menos un autor tiene como filiación la Facultad de Física de la Universidad de La Habana. Esta búsqueda no incluye artículos que hayan sido firmados a nombre de otras instituciones, tampoco incluye artículos de física publicados por investigadores de otras áreas de la Universidad de La Habana diferentes a la Facultad de Física. Estos datos fueron comparados con las estadísticas recopiladas por la propia Facultad en años recientes, y la coincidencia parece ser bastante buena, tomando en cuenta que estas últimas estadísticas no son exactamente anuales, sino en periodos que van de octubre a octubre en cada año. De cualquier manera, el resultado no está exento de errores típicos de este tipo de recopilación bibliométrica relacionados con la precisión que usaron los autores de este trabajo a la hora de expresar los términos de búsqueda u otras. No obstante, creemos que el comportamiento general sirve para mostrar la

productividad científica de la institución en el período que se analiza.

Si tomamos en cuenta que el claustro de la Facultad ha oscilado entre 50 y 60 de profesores durante su historia, se puede apreciar de esta figura que el índice de publicaciones es razonablemente bueno, sobre todo considerando la extraordinaria falta de recursos que ha padecido la actividad científica, particularmente a partir de la crisis de los noventa, y a la carencia de un edificio propio a partir de 2006. El número total de artículos encontrados en la base de datos a partir de 1987 es de 922.

Es curioso que sea precisamente a partir de la década de los noventa cuando se produce un incremento sustancial y sostenido del índice de publicaciones. Este hecho parece responder a dos factores. El primero es un cambio de política en la que se priorizó dar visibilidad a los resultados de la investigación científica y se promovió la publicación como un índice importante para la evaluación de la actividad científica. El otro factor tiene que ver con un incremento relativamente abrupto y una diversificación de la colaboración científica internacional, como se ha sugerido en trabajos anteriores [7].

En la Tabla I se reportan las revistas (de la base de datos SCOPUS) en las que se han publicado tres o más artículos en los cuales al menos un autor tiene la filiación en la Facultad de Física de la Universidad de La Habana. El bajo número de artículos en la Revista Cubana de Física responde al hecho de que esta fue indexada recientemente en la base de datos SCOPUS, exactamente en 2011. Entre las revistas con menos de tres artículos publicados por autores de la Facultad de Física (y que por lo mismo no aparecen en la tabla) se encuentran algunas de muy alto índice de impacto como son: *Adv. Func. Mat.* (10,179), *Nanoletters* (13,198) y *Rev. Mod. Phys.* (33,985) (aquí y, en lo adelante, citamos los factores de impacto reportados por Thomson y Reuters en 2011).

Todo parece indicar que la Facultad de Física de la Universidad de La Habana, siendo una institución docente, es el centro con mayor índice de publicaciones por persona actualmente en el país. Los profesores de la Facultad, sólo en los últimos cinco años acumulan 6 premios internacionales, 28 nacionales y 28 a nivel de la Universidad. También en los últimos cinco años, los profesores han organizado siete congresos internacionales y cinco nacionales. El actual presidente del Centro Latinoamericano de Física (CLAF) es un miembro del claustro de la Facultad de Física. También un miembro del Comité Regional Latinoamericano del Consejo Internacional de Ciencias (ICSU), y uno de los vocales de la Federación Iberoamericana de Sociedades de Física (FEIASOFI) y el enlace cubano de la International Union of Pure and Applied Physics (IUPAP) son profesores de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana.

Egresados de la licenciatura en Física, además, son hoy líderes científicos en otras instituciones del país, especialmente el Polo

Sin embargo, estos hechos parecen influir poco sobre la toma de decisiones de política científica en la arena nacional. Los escasos recursos dirigidos a la física, incluso en áreas donde es evidente el liderazgo universitario, tienden a asignarse a otros centros; se anularon esfuerzos para incrementar el número de estudiantes como lo fue la creación de la carrera de ingeniería

física; se eliminó el examen requisitos especiales para el ingreso, se ha dilatado más allá de lo razonable el proceso de reconstrucción del edificio sede de la facultad; se dificulta la renovación del personal por la vía de los recién graduados y, por último, a las carencias de equipamiento e infraestructura se suman (por primera vez en la historia) restricciones al consumo de electricidad en instalaciones de física experimental que han afectado incluso la impartición de las clases.

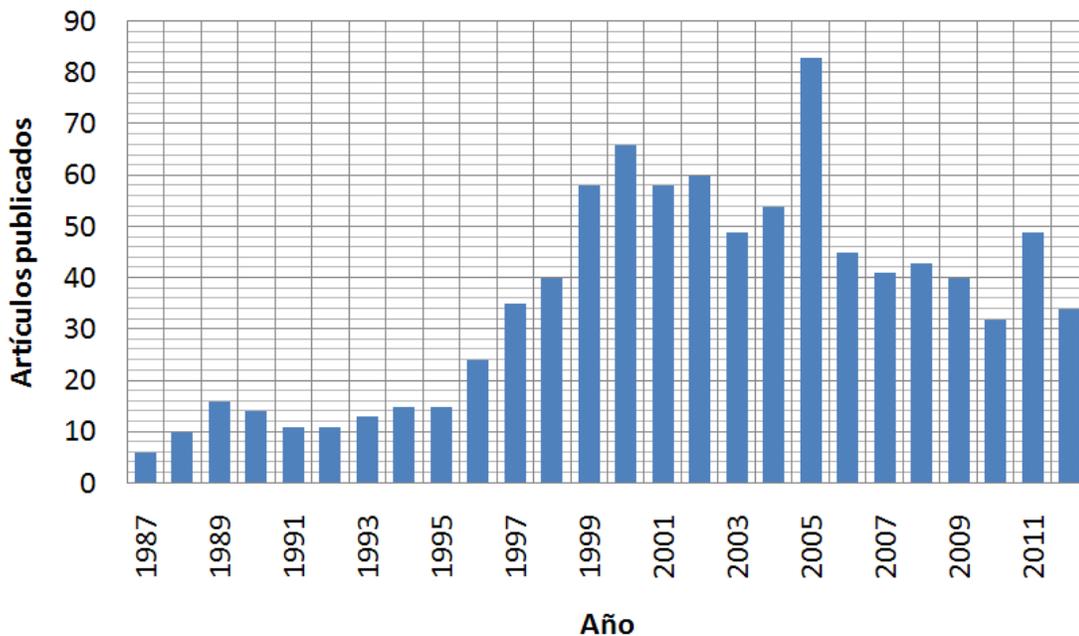


Figura 4. Artículos publicados por profesores de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana en los últimos 25 años, según una búsqueda en la base de datos SCOPUS.

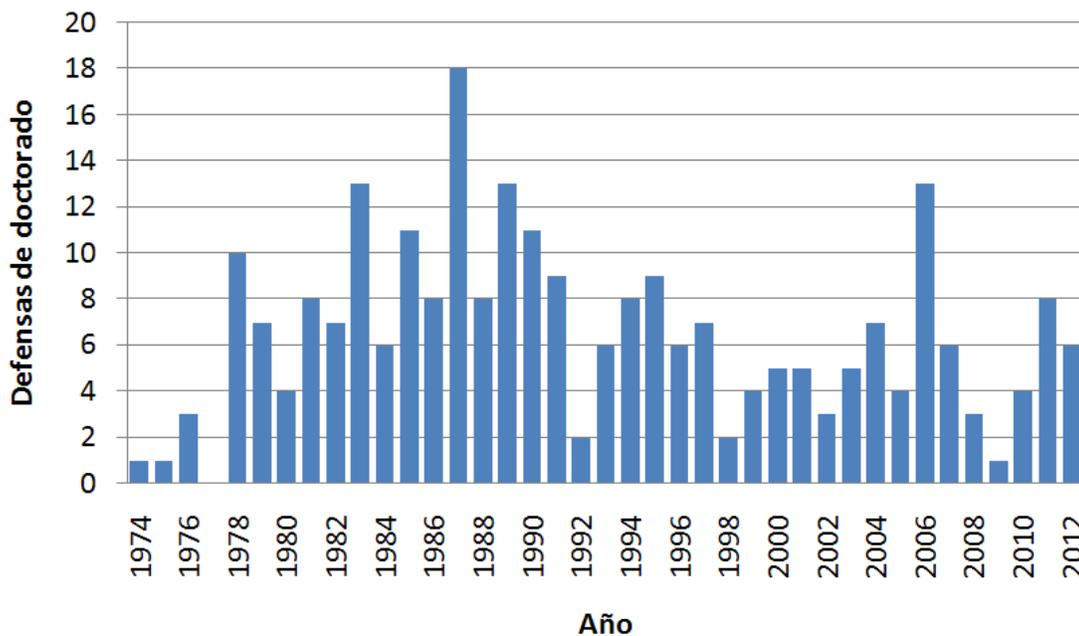


Figura 5. Distribución de las defensas de doctorado del programa de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana por año.

Tabla I.

Revistas científicas con 3 o más artículos en los cuales al menos un autor tiene la filiación de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana. Se incluye el número de artículos publicados (N) y el factor de impacto (F. I.) de la revista.

Revista	N	F. I.
Phys. Rev. B	110	3,691
J. Appl. Phys.	59	2,168
Phys. Stat. Sol. B	55	1,316
Rev. Mex. Fis.	35	0,366
Physica C	30	1,014
J. Magn. Mag. Mat.	26	1,780
Rev. Cub. Fis.	20	0
J. Phys. Cond. Mat.	20	2,546
Sol. State. Comm.	17	1,649
Apl. Phys. Lett.	17	3,844
Microelectron. J.	17	0,919
Thin Sol. Films	17	1,89
Mat. Lett.	16	2,307
Sem. Sci. Technol.	16	1,723
J. Crys. Growth	15	1,726
J. Mat. Sci.	14	1,076
Phys. Stat. Sol. C	13	0
Phys. Rev. E	13	2,255
Mat. Res. Soc. Simp.	12	0
Ferroelectrics	12	0,391
Superlat. & Microst.	12	1,487

Revista	N	F. I.
Physics B Cond. Mat.	10	1,063
Phys. Rev. Lett.	10	7,37
J. Phys. D	9	2,544
Phys. Scripta	9	1,204
Braz. J. Phys.	9	0,754
J. Mat. Sci. Lett.	8	2,015
Physics A	8	0
J. Physique IV	8	0,401
Appl. Phys. A	7	1,63
Solar Energ. Mat. & Solar Cells	7	4,542
J. Alloys Comp.	7	2,289
J. Electroceram.	7	0,676
Modern Phys. Lett. B	7	0,512
Corrosion Science	7	3,734
Rev. Sci. Inst.	6	1,367
Phys. Stat. Sol. A	6	1,463
Eur. Phys. J. B	6	1,534
Powder Diffract.	5	0,707
Mat. Chem. Phys.	5	2,234

Revista	N	F. I.
Mat. Sci. Forum	5	0
Micro. Meso. Mat.	5	3,285
Appl. Surf. Science	5	2,103
Mat. Sci. Eng. B	4	1,518
Phys. Lett. A	4	1,632
Meas. Sci. Technol.	4	1,494
J. Non Crys. Sol.	4	1,537
Int. J. Thermophysics	4	0,75
Physica D	4	1,594
Europhys. Lett.	3	2,171
Sol. State Electron.	3	1,397
High Temp. High. Pres.	3	0
J. Opt. Soc. Am.	3	1,936
Surf. Sci.	3	1,994
J. of Superconductivity	3	0,65
Corrosion	3	0
Int. J. Mod. Phys.	3	1,053
J. Vac. Sci. Technol.	3	1,253
J. Mat. Res.	3	0,83
Physics B	3	1,875
Physics E	3	0

CONCLUSIONES

A 50 años de licenciatura en Física en Cuba se estima que hayan egresado algo menos de 1500 estudiantes en las tres universidades que poseen la carrera. En particular en la Universidad de La Habana lo han hecho 956 estudiantes. En el programa cubano de posgrado en Física se han graduado 162 maestros y 252 doctores en Ciencias Físicas. En contraste con el panorama anterior a la reforma universitaria de 1962, estos resultados constituyen, sin dudas, un logro trascendente –reconocido tanto nacional como internacionalmente.

Un análisis detallado en el caso de esta universidad muestra que matrículas muy grandes en los años setenta no representaron un apreciable incremento, a la larga, en el número de egresados ni en la promoción de esas generaciones. De hecho, la reducción observada en las matrículas a partir de finales de los setenta hasta inicios de los años noventa del siglo XX estuvo más bien acompañada de un incremento de la promoción. Desde esa época la matrícula se ha estabilizado en un valor más bien bajo que no parece haber sido influido notablemente por las varias políticas tendientes a favorecer el ingreso, que se pusieron en marcha en los últimos años. Cabe especular que estas políticas pueden haber servido para que las matrículas no fueran aun más bajas. Por otra parte, los datos parecen indicar que el nuevo sistema de ingreso inaugurado en 2003 ha dado como resultado una estabilización de la promoción en un valor muy cerca del promedio histórico. Esto se presenta coherente con el hecho de que el nuevo sistema de ingreso haya mejorado la selección de los estudiantes.

Las cifras que muestran la productividad científica y en general la calidad del desempeño académico de los profesores del claustro de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana, hacen pensar que tal vez sería útil y necesario un cambio en la política académica que desde hace algún tiempo parece haber ignorado o menospreciado demasiadas cosas. Este trabajo no pretende constituir una apología de los físicos cubanos: intenta, ante todo, aportar datos concretos. Tampoco pretende ser un lamento estéril, sino provocar una reflexión fértil. Quede a los lectores descifrarla y compararla, por el bien de la física cubana.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a Odalys González y Mercedes Coderch por la ayuda para recabar algunos de los datos estadísticos presentados en este trabajo.

- [1] O. de Melo, Rev. Cub. Fis. **19**, 30 (2002).
- [2] L. Méndez Pérez, A. Baracca, Rev. Cub. Fis. **18**, 146 (2001).
- [3] A. Baracca, V. Fajer, C. Rodríguez (2012) (en tomo dedicado a la Física en Cuba, dentro de la serie “Boston Studies in the Philosophy and History of Science”, Springer, en imprenta).
- [4] P. Muné, J. J. Guillamón, L. M. Méndez, Rev. Cub. Fis. **29**, 2 (2012).
- [5] L. M. Méndez, E. J. Roca-Oria, C. A. Cabal-Mirabal, Rev. Cub. Fis. **29**, 33 (2012).
- [6] A. Baracca, V. Fajer, B. Henríquez, Revista Iberoamericana de Física **1**, 54 (2005).
- [7] E. Altshuler, Rev. Cub. Fis. **22**, 173 (2005).

LECTIO HONORIS CAUSA EN CIENCIAS FÍSICAS DEL PROFESOR FABRIZIO LECCABUE

Aunque a veces los físicos miramos a la Química con cierto recelo, un sentimiento totalmente opuesto fue el que primó en el Aula Magna de la Universidad de La Habana el día 20 de julio de 2012, cuando se le confirió el título de profesor Honoris Causa al químico italiano Fabrizio Leccabue, a propuesta de la Facultad de Física. En el acto participaron la Vicerrectora de Investigaciones de la Universidad de La Habana, Dra. Leslie Lláñez, el embajador de Italia en Cuba, Carmine Robustelli, la decana de la Facultad de Física, Dra. María Sánchez-Colina, el Presidente de la Sociedad Cubana de Física, Dr. Augusto González, y docenas de físicos cubanos y mexicanos. En su discurso de aceptación, además de expresar interesantes puntos de vista sobre la Ciencia y la Sociedad, Leccabue glosó una interesante parte de la historia de la Física cubana en la cual se ha visto involucrado desde 1969 hasta hoy día. Por su influencia en el desarrollo de la Física del Estado Sólido en Cuba, que ha marcado indeleblemente la carrera de Física durante muchos años, reproducimos íntegramente el discurso en el presente número de la Revista Cubana de Física.

En el mismo escenario, y en igual fecha, le fue concedida la condición de Miembro de Mérito de la Sociedad Cubana de Física al físico mexicano Feliciano Sánchez-Sinecio, que ha mantenido una fructífera colaboración con físicos cubanos por dos decenios.



El italiano Fabrizio Lecabbue, tras habersele entregado la condición de Doctor Honoris Causa, firma el libro de rígor en el Aula Magna de la Universidad de La Habana, el día 20 de julio de 2012. Sentado en la presidencia, a su izquierda, Augusto González, Presidente de la Sociedad Cubana de Física. A su derecha, Carmine Robustelli, embajador de Italia en Cuba, y María Sánchez-Colina, decana de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana. (Foto: Julio Vidal)

DISCURSO PRONUNCIADO POR EL PROFESOR FABRIZIO LECCABUE CON MOTIVO DE RECIBIR EL *HONORIS CAUSA* DE LA UNIVERSIDAD DE LA HABANA EL 20 DE JULIO DE 2012

Estimada Vice Rectora de La Universidad de La Habana
 Estimada Decana de La Facultad de Física
 Estimado Presidente de la Sociedad Cubana de Física
 Estimado Embajador de Italia
 Estimadas y Estimados Colegas Cubanos y mexicanos

Señoras y Señores:

Tengo que confesar cierta vergüenza porque advierto una desproporción entre el honor que la Universidad de La Habana quiere rendirme, y mi persona. Estoy convencido que este honor es también un signo de amistad y de cariño... y creo que a la cooperación científica con los físicos cubanos; la amistad, la estima y el cariño siempre estuvieron en la base de nuestras relaciones. Y yo que soy un "hombre del siglo pasado": siempre

he necesitado y sigo necesitando amistad. Por esto estoy muy muy agradecido a todos ustedes.

Se también que me toca hacer un discurso –una *lectio*– como la importante circunstancia requiere, y esto me espanta un poco. No creo que nadie espere un ejercicio académico, entre otros motivos, porque somos científicos experimentales y tenemos un acercamiento "natural" a la realidad de tipo experimental: al fin y al cabo, y en síntesis, somos hijos de Galileo Galilei.

Intentaré rastrear las razones por las cuales la Universidad de La Habana me otorga el título de Doctor *Honoris Causa* en Ciencias Físicas, un poco para permanecer fiel a mí mismo con respecto a una "ética de la convicción" y a una "ética de la responsabilidad" que siempre he intentado poner en la práctica

de mi vida cotidiana –sea en las relaciones científicas como en las personales.

Por esto me gustaría dividir este discurso en dos partes: una primera sobre mi colaboración específica con los físicos cubanos, y una segunda, acerca del papel de la ciencia, de los científicos y de los investigadores en la sociedad contemporánea.

Entonces, primero, voy a hablarles de:

I. MI COLABORACIÓN CIENTÍFICA CON LOS FÍSICOS CUBANOS

El primer contacto directo con la comunidad científica cubana se realizó en 1969, cuando el primero de cuatro jóvenes físicos, Joaquín Torres Orozco, llegó a Parma, al Departamento de Física de la Universidad, a través de la beca “Andrea Leviardi”, un programa promovido por el Prof. Roberto Fieschi y que vio comprometidos a centenares de estudiantes y profesores de la comunidad científica italiana.

En 1974 participé en una “escuela de verano” organizada por la Escuela de Física de la Universidad de La Habana y fue precisamente durante ese período cuando tuve la posibilidad de acercarme más a las tareas, las dificultades, los problemas y los objetivos de la investigación científica en Cuba.

En 1981 decidí tomar un año sabático para trabajar aquí en Cuba –principalmente para promover investigaciones y colaborar más directamente en el ámbito del crecimiento de cristales– y más en general, en el ámbito de las ciencias de materiales, dedicando nuestra atención sobre todo a dos clases de materiales: calcopiritas y materiales magnéticos duros.

Fue durante este período cuando descubrí una “nueva” generación de físicos, crecidos después de la Revolución: Pedro Díaz, Juan Fuentes, Luís Hernández, Osvaldo Vigil, Julio Vidal, Fernando González. Con algunos de ellos había trabajado en los primeros años setenta, cuando estuvieron en Parma a través de la beca “Leviardi”. Una generación muy dinámica intelectualmente y muy dedicada a los “nuevos” problemas científicos y tecnológicos, con la conciencia de que la investigación básica es fundamental para las aplicaciones. Muy dedicada, además, a impartir clases y a la formación de nuevos físicos; muy atenta a superar las dificultades económicas en Cuba, principalmente debidas al bloqueo económico norteamericano.

En los años siguientes entré en contacto con una segunda y una tercera generaciones de profesores e investigadores: Osvaldo de Melo, Diego Seuret, Francisco Calderón, Celia Hart, Oscar Arés, José Luis Sánchez, Sergio Díaz, Nelson Suárez, Ignacio Pérez, Enrique Vasco, Juan García Rodríguez, Daniel Carrillo, Humberto Rodríguez y, finalmente, Julio Rimada. Menciono a todas estas personas, y espero no haber olvidado a nadie, porque efectivamente hemos logrado crear una masa crítica

importante y desarrollado un trabajo constante en el tiempo. Masa crítica y trabajo constante son las características de nuestra colaboración en todos estos años.

En el marco de esta colaboración y esfuerzos yo tenía la impresión, y probablemente también mis colegas cubanos, de que el intercambio científico con la Unión Soviética era seguramente útil e importante, pero no cubría completamente el área y los intereses científicos en el campo de la investigación. Así que en nuestros encuentros, discusiones y conversaciones surgió la idea de desarrollar una amplia colaboración internacional que incluyera becas para los investigadores cubanos en Europa y América Latina y, al mismo tiempo, promover condiciones materiales para la investigación, aquí en La Habana, con equipos, reactivos, bibliografía, libros, insumos, etc....Es con esta idea que los esfuerzos mío y de los colegas cubanos de la primera y segunda generación se focalizaron en organizar talleres y conferencias internacionales, aquí en La Habana, a pesar de las dificultades económicas y del aislamiento de Cuba.

Tengo que subrayar que los colegas cubanos jugaron un papel importantísimo, no solamente en la organización de los eventos, sino en la elaboración de proyectos y en la consolidación de redes científicas, demostrando una elevada profesionalidad y un fuerte sentido analítico y crítico.

Una ayuda significativa en este proceso, tengo que mencionarlos, llegó, a través de becas, subvención de visitas y apoyo financiero a las conferencias, por parte del ICTP (International Centre of Theoretical Physics) de Trieste, de la IILA (Instituto Italo Latino Americano) de Roma y del CNR (Consejo Nacional de Investigación Italiano).

Voy a poner tres ejemplos significativos:

A. Desde 1983 se consolida una red muy amplia que ve involucrados a distintos investigadores e Institutos científicos: en el área de magnetismo, Antonio Hernando (Universidad Complutense de Madrid), Manuel Vázquez (Instituto de Ciencias de Materiales de Madrid/CSIC); en el área de microelectrónica y sensores, Fernando Briones (Instituto Nacional de Microelectrónica de Madrid/CSIC); en el área de magnetismo, Dominique Givord (CNRS de Grénoble); en el área de microscopía electrónica, Grössinger y Fidler (Universidad Técnica de Viena); en el área de materiales piezo-ferroeléctricos, María de Matos Gomes (Universidad de Minho de Braga); en el área de semiconductores, Feliciano Sinencio e Isaac Hernández (CINVESTAV-IPN del Distrito Federal); en el área de magnetismo José López Morán y Manuel Mirabal (Universidad Autónoma de San Luís Potosí); en al área de semiconductores, Juan Luís Peña y Román Castro (CINVESTAV-IPN de Mérida); en el área de magnetismo, Frank Missell (Universidad de São Paulo); en al área de semiconductores y magnetismo (Mössbauer), Nicola Romeo y Gianfranco Albanese (Departamento de Física de la Universidad de Parma); en al área de semiconductores, Dario

Nobili y Enrichetta Susi (Instituto LAMEL/CNR de Bologna); en el área de semiconductores y magnetismo, entre otros, Claudio Bocchi, Bernard Enrico Watts, Claudio Pelosi, Luigi Pareti, Rodolfo Panizzieri y Enrico Melioli (Instituto IMEM/CNR de Parma).

B. En 1991, en pleno “período especial” (y ustedes saben y conocen mejor que yo que ha significado en concreto el período especial) organizamos en La Habana el Primer Workshop Latino Americano sobre “Magnetismo, Materiales Magnéticos y sus Aplicaciones”, apoyado por IUPAP, ICTP, IUCr, CLAF, CIF y el CNR italiano.

Abrimos nosotros el camino, siguió un segundo Workshop en 1993 en San Luís Potosí (México); un tercero en 1995 en Mérida (Venezuela), un cuarto en 1997 en São Paulo (Brasil); un quinto en 2001 en Bariloche (Argentina); un sexto en 2003 en Chihuahua (México); un séptimo en 2005 en Temuco (Chile); y un octavo en 2007 en Rio de Janeiro (Brasil).

C. Desde 1995 hasta 1997 constituimos una red a través de una acción europea, Action COST 514, sobre “Capas Delgadas de Materiales Ferroeléctricos”. Formaban parte de la red: el Instituto IMEM del CNR italiano, la Facultad de Física de la Universidad de La Habana, el Departamento de Física de la Universidad de Braga (Portugal), NMRC de la University College de Cork (Irlanda), la Universidad Federal de San Carlos (Brasil), la Universidad Nacional Autónoma de Ensenada (México); y el Departamento de Física de la Universidad Católica del Norte de Antofagasta (Chile).

Me he detenido en estos tres ejemplos con algunos detalles. Sin embargo, nuestro esfuerzo fue seguido por otros eventos internacionales, con la publicación de los *Proceedings*, y sobre todo, no hay que olvidar las actividades científicas que siempre se ha movido en la identificación de “nuevos” materiales de interés para aplicaciones o materiales “antiguos” con tecnologías de preparación “nuevas”. Así, pasamos desde las calcopirritas y aleaciones relativas de interés para el fotovoltaico, a los materiales magnéticos duros –ferritas hexagonales en particular–, incluyendo también las aleaciones intermetálicas (SmCo_5 , NdFeB), para sistemas mecánicos acoplados magnéticamente, y materiales magnéticos blandos (FeSiB) en forma amorfa, nano- y micro-cristalina, producidos mediante *melt-spinning*, de interés como sensores. Trabajamos sobre materiales piezo- y ferroeléctricos para memoria no volátil (PZT, SBT), obtenidos mediante *pulsed laser ablation* y *sol-gel processing*. Y más recientemente la actividad científica incluyó el proyecto y la construcción de un reactor MOCVD para preparar capas delgadas de carburo de silicio (SiC).

Dedicamos una parte importante del trabajo y de nuestra actividad a la supervisión de Tesis, de maestría y doctorado, así como a la supervisión de las becas otorgadas por el ICTP, la IILA y el CNR.

En las conclusiones de un artículo que alguna vez escribí

sobre mi colaboración con los físicos cubanos, evidenciaba que hemos obtenido muchos resultados científicos, pero hoy en día, probablemente, hay que renovar nuestra actitud hacia los proyectos y objetivos científicos, tomando en cuenta los cambios y el desarrollo de la ciencia, de las metodologías y de las nuevas técnicas, y de las nuevas tecnologías que aparecieron y están constantemente apareciendo en el mundo.

Esta consideración final es un poco para introducir la segunda parte de mi discurso:

II. ¿CUÁL ES EL PAPEL DE LA CIENCIA Y DE LOS CIENTÍFICOS HOY, EN LA SOCIEDAD CONTEMPORÁNEA?

Unos cuarenta años de actividades científicas nos llevan a plantear algunas consideraciones y preguntas, asumiendo que en estos cuarenta años el “mundo” ha cambiado profundamente no sólo en la relación entre los Estados, los tipos de conflictos, el dominio del “libre mercado” –la misma economía capitalista cada vez más dominada por una economía “virtual”, sería suficiente pensar en la palabra mágica “globalización”. Es precisamente por estos cambios profundos por lo que hay que volver a replantearse el papel de la ciencia, de la investigación y el “nuevo” papel que los investigadores y los científicos tendrían que desempeñar en este nuevo contexto político, social y cultural.

Si pienso en la revolución industrial que atravesaba Europa en los siglos XVIII - XIX y en el “lento” proceso que implicó y que provocó cambios no solamente en las relaciones industriales, sociales y políticas sino también en las relaciones personales, en el pensamiento y en los modelos de vida y perspectivas de vida; si pienso también en los logros y las conquistas del movimiento obrero y sindical, en los cambios profundos de las sociedades, en particular en Europa y en el llamado “primer mundo”, creo que tenemos que profundizar, reflexionar, y actualizar con un análisis “crítico” lo que está pasando hoy en día.

Charles Snow, físico y escritor inglés, presentó en una conferencia en Cambridge en 1959 un trabajo sobre *Las dos culturas y la revolución científica*, de donde salió el ensayo *Las dos culturas* [1] que fue objeto de un amplio debate entre científicos y hombres de letras. Me gustaría destacar dos puntos, que creo importantes, de este libro.

En el primero, es que Snow pone en evidencia que nadie puede ser hoy (y lo dijo, tenemos que subrayarlo, en 1959), tan ciego que no se dé cuenta del hecho que la existencia de dos culturas, tan diferentes y distantes entre sí como la cultura humanista-literaria y la científico-técnica es una de las principales razones de la crisis de nuestra civilización. Este malentendido entre los humanistas y los científicos cada vez se complica más, hace perder de vista el “significado” de la sociedad donde vivimos y de la sociedad que queremos construir. Más aún, produce en la cultura tradicional una suerte de “cultura a la mitad”.

El segundo punto se refiere a la distinción que Snow propone entre la revolución industrial y la revolución científica. La revolución industrial se realiza a través de la utilización gradual de las máquinas, el empleo de hombres y mujeres en las fábricas, a través de la transformación que se produjo en una población compuesta en gran parte de trabajadores agrícolas y que se convierten en una población principalmente ocupada en la producción, en las fábricas, y en la distribución de los productos fabricados. Algo diferente ocurre cuando por primera vez se utilizan a nivel industrial las partículas atómicas. La sociedad industrial de la energía atómica, de la electrónica, de la automatización, produjo, tanto en aspectos teóricos fundamentales como en concreto en la cotidianidad, cambios específicamente diferentes de cualquier otra sociedad pasada, y eso ha producido una transformación muy profunda en el mundo. “Y esta transformación, nos sugiere Snow, merece el nombre de “revolución científica”.

Una de las contradicciones, una de las novedades en el ámbito filosófico, y podríamos decir a nivel también sociológico y antropológico, más evidentes en este proceso de transición desde la revolución industrial hacia la revolución científica, es el cambio de relación entre el hombre y las “cosas” que él produce, sobre todo por lo que se refiere a la utilización de la energía atómica y, en concreto, a la utilización de la bomba atómica.

¿Qué es lo que ha cambiado radicalmente entre el hombre y su “nuevo” descubrimiento?

Günther Anders, filósofo austríaco, en su libro “El hombre es anticuado”, publicado en 1956 [2], nos sugiere que este cambio ha adelantado la historia a una “nueva” era, y los nombres que tendríamos que darle a las eras tendrían que ser: 1ª era. Todos los hombres son mortales; 2ª era. Todos los hombres son susceptibles de ser eliminados; 3ª era, la actual. La humanidad entera es susceptible de ser eliminada, la raza humana puede desaparecer por completo. El cambio substancial está en el hecho de que el descubrimiento, la “cosa” inventada por el hombre, tiene una capacidad destructiva que va más allá de ser un simple “medio”. Normalmente el “medio” se agota en su propósito y la bomba atómica puede tener un efecto no solamente mayor que su propósito, sino que puede poner en duda cualquier otra posibilidad de plantear otros propósitos, podría llegar a cancelar el principio medios-fines, como tal.

Pues bien, hoy, estamos en plena revolución tecnológica y todo es mucho más “rápido”: los cambios se realizan no en centenares de años sino en meses, en semanas y son cambios, al mismo tiempo, muy profundos. Creo que estamos dentro de un proceso de superación de la revolución científica, lo que se está introduciendo e imponiendo, conscientemente o no, es una nueva etapa de la historia: una revolución tecnológica.

Hoy en día, es probable que no nos demos cuenta plenamente, pero ya estamos en plena revolución tecnológica y el resultado final es que los “rápidos” cambios no solamente afectan a

la reorganización capitalista en todo el mundo –el sistema industrial y el intercambio desigual– sino que pone en duda los logros de los trabajadores y la misma democracia burguesa liberal. Y estos rápidos cambios están fuertemente apoyados por las innovaciones científicas tecnológicas introducidas en el mundo industrial, en la vida social y en las vidas mismas diarias de los ciudadanos. Parece que los “ismos” del siglo pasado han sido sustituidos por los “icas”: *informática*, *telemática*, *robótica*, *cibernética*, *domótica*, *mecatrónica*. Los “ismo” con sus contenidos políticos ideológicos han sido sustituidos por los “ica”, aparentemente neutros y aparentemente puramente técnicos.

Si los lentos procesos del pasado han sido sustituidos con fuerza y prepotencia por procesos rápidos, la pregunta que nos ponemos es: ¿Cómo estamos preparados los científicos e investigadores para hacer frente a esta nueva situación? ¿Las nuevas tecnologías con todo lo que implican a nivel económico y social, y también a nivel de la vida cotidiana, favorecen el desarrollo del hombre, contribuyen a desarrollar una sociedad mejor? ¿Cuál es el papel de la ciencia y de los científicos hoy, en la sociedad contemporánea?

Me resulta natural citar a un intelectual italiano del siglo XX, Franco Fortín¹. Es una nota donde nos dice que “cultura y política son la misma cosa, expresadas con distintos medios; que si hay una diferencia es la que hay entre dos teorías y dos políticas; que cada vez que un pensamiento no tiene manos o las tiene débiles o que las manos no tienen un pensamiento o lo tienen débil serán un abstracto pensamiento y una vulgar política”.

He extendido deliberadamente el problema para decir simplemente que el intelectual no es sólo el filósofo, el escritor, el pintor, el músico, el actor, sino también el arquitecto, el economista, el ingeniero, el médico, el físico, el científico, el investigador.

Primo Levi, un importante escritor italiano –además químico de profesión– observaba “La distinción entre el arte, la filosofía, la ciencia no la conocían Empédocles, Dante, Leonardo, Galileo, Descartes, Goethe, Einstein, o los constructores anónimos de las catedrales góticas, o Miguel Ángel, no la conocen los buenos artesanos de hoy ni los físicos vacilantes al borde de lo cognoscible” [3].

En la parte final del discurso sobre “Nanociencias, entre la Física y la Biología” leído por el Dr. Fernando Briones en la Real Academia de Ciencias Exactas, Física y Naturales de España en el Acto de su recepción como Académico [4], Briones concluye con algunas consideraciones muy interesantes y estimulantes: “... El desarrollo previsible de las nanociencias, el desarrollo paralelo de la información y la computación cuántica y el de la física de la complejidad, van a ser instrumentales en este siglo para la comprensión y

1 Franco Fortini, pseudónimo de Franco Lattes (Florencia, 10/9/17 –Milán, 28/11/94), ensayista, crítico literario y poeta italiano.

modelización de los procesos evolutivos. Insistimos de nuevo en que la naturaleza cuántica de los nano-procesadores moleculares es la que les confiere la capacidad elemental de calcular su configuración y funcionamiento en tiempo real, es decir, la capacidad de seleccionar continuamente entre las diferentes opciones que aparecen por fluctuaciones del entorno. Más aún, la vida no es probablemente la última vía evolutiva. Precisamente, por medio del hombre, ha sido posible la aparición de toda una fauna de códigos evolutivos de nuevo tipo, vivos a través de los medios no biológicos de transmisión y almacenamiento de información como son el lenguaje, la escritura, la imprenta, las memorias, los procesadores electrónicos y, últimamente, las redes globales de comunicaciones. Se ha abierto, en suma, una nueva e interesantísima, para nosotros, vía evolutiva.

Somos actores involuntarios y, al mismo tiempo, espectadores de un desarrollo rapidísimo cuyas formas y especies compiten en el ecosistema de las ideas, las artes plásticas, la música, la literatura, la poesía, las ciencias y la tecnología, y cuyas consecuencias superan totalmente a nuestra propia imaginación.”

Las observaciones del Dr. Fernando Briones, nos estimulan a reflexionar respecto a los “nuevos” e inimaginables avances y descubrimientos científicos, las “nuevas” posibilidades que se abren para la humanidad –se supone una “nueva” vía evolutiva– y la nanociencia y la nanotecnología son una parte muy importante y crucial de este nuevo proceso. Por eso, creo, vale la pena destacar las “nuevas” responsabilidades que competen al científico, al investigador y al mundo de la ciencia en su conjunto.

Haciendo estas consideraciones no he mencionado lo que ha pasado en el llamado tercer mundo o en los países “en desarrollo” o países “pobres”. No he hablado de las nuevas formas de dependencia económica y cultural que afectan estos países, como no he analizado tampoco las contradicciones que se han producido en el llamado Primer Mundo, creando una especie de “cuarto mundo”, en su entrañas. Sin duda, esto merece un análisis cuidadoso, para evitar, una vez más, una visión y una interpretación eurocéntrica de los procesos históricos.

Un querido amigo, filósofo italiano, Rino Genovese, en su libro “La tribu occidental” [5], pone en evidencia algunas contradicciones presentes en este proceso de “modernización” acelerada de nuestras sociedades. Permanecen elementos arcaicos que conviven con la modernidad, la omnipresencia de la comunicación, la “aldea global”, la “homologación” del pensamiento y de los comportamientos son elementos propios y contradictorios en estas sociedades, y creo que fueron resumidos muy bien por Francisco de Goya en su pintura profética “El sueño de la razón produce monstruos”. La modernidad tiene sus raíces en el iluminismo, y tenemos que salir desde la paradoja que el iluminismo, con todo su universalismo, permanezca “tribalmente” occidental.

Si el pensamiento, hoy en día, es único y global, dominado por leyes oscuras e incontrolables, de manera que no se perciben exactamente dónde están los “poderes fuertes” de decisión, hay que elaborar un pensamiento “diferenciado”, un pensamiento “crítico”; hay que elaborar modelos de desarrollo “alternativo” en los cuales los científicos pueden y deben jugar un papel decisivo.

Cada vez más, la ciencia es parte de un sistema complejo en el cual la interdisciplinariedad es fundamental; la ciencia y las tecnologías influyen cada vez más en la economía, en el sistema industrial, en la medicina, en la sociedad y el tipo de sociedad, en el mismo sistema educativo.

Hay unas líneas de Snow muy hermosas, en las que pregunta a un grupo de amigos intelectuales: “¿Cuál es la segunda ley de la termodinámica” y recibe unas respuestas frías y negativas. Sin embargo, escribe Snow, sólo preguntaba algo que es el equivalente científico a “¿Habéis leído una obra de Shakespeare?” o si hubiera hecho otra pregunta más simple todavía: “¿Qué entendéis vosotros por masa o por aceleración”, que es el equivalente científico a “¿Sabéis leer?” [1].

Por esto y más aún hoy en día no podemos desarrollar una “cultura demediada”, tenemos que rechazar una cultura tradicional y dominante a-científica y, a veces, anti-científica; necesitamos una cultura común, unitaria donde el médico, el biólogo, el físico, el antropólogo, los hombres de letras, los intelectuales y todo lo que es parte fundamental de nuestra sociedad contemporánea, con su complejidad, jueguen su papel.

He intentado analizar, aunque brevemente, cómo desde la revolución industrial, proceso lento, llegamos a la revolución científica, proceso rápido, para llegar, hoy en día, a la revolución tecnológica, proceso rapidísimo, con los cambios profundos, diría estructurales, que estos procesos han introducido, históricamente, en nuestras sociedades.

Yo soy partidario de los procesos “lentos” –en “equilibrio”, diría un químico–, ¡sin rechazar lo “nuevo”, lógicamente! Lo ‘nuevo’ y los procesos rapidísimos son, de hecho, parte de la realidad y tenemos que prepararnos para comprenderlos, controlarlos, analizarlos “críticamente”, dirigirlos hacia el bien común, hacia el hombre y en función del hombre.

Italo Calvino, otro importante escritor italiano, en sus “Lecciones americanas” [6] analiza algunas palabras clave, una de ellas es la “rapidez” y como ejemplo, entre otros, propone el pensamiento de Galileo Galilei.

“Discurrir (*il discorrere*), por Galileo Galilei, significa razonamiento, y, a menudo, razonamiento deductivo. “Discurrir es como correr” –esta declaración de Galileo es la idea que da fuerza a su pensamiento y a su actividad experimental, un método de pensamiento y, también de su gusto literario: la rapidez, la agilidad del razonamiento, la

economía de los temas, y también la imaginación son para Galileo cualidades decisivas de un buen pensamiento.”

La “rapidez” puede ser propia de la inteligencia de los hombres y de las mujeres. A la “rapidez” de la revolución tecnológica hay que contraponer la “rapidez” de la inteligencia. Creo que la rapidez del pensamiento es una de las formas actuales y concretas para controlar y dirigir los procesos rapidísimos presentes en la “compleja” sociedad en que vivimos. Creo que lo que puede y debe asumir el científico, hoy, es una fuerte responsabilidad social, activa y comprometida.

José Saramago, escritor portugués, Nóbel de Literatura, en su romance “*La caverna*” nos sugiere que: “Sabríamos mucho más de la complejidad de la vida si nos hubiéramos aplicado con determinación en el estudio de sus contradicciones, en lugar de perder tiempo con las identidades y las coherencias, que tienen la obligación de explicarse por si mismas” [7].

En este discurso, he tratado de poner de relieve algunos aspectos relacionados con la ciencia y la sociedad, entre los científicos y las innovaciones tecnológicas, algunas cuestiones las he esbozado solamente y hay que profundizarlas, otras pueden ser seguramente cuestionables.

Por último. Quiero agradecer a la Universidad de La Habana por este honor y porque me ha obligado a pensar un poco en esos 40 años de trabajo científico. Muchas gracias a los colegas físicos por su contribución, y creo sinceramente que es también gracias a ellos por lo que hoy recibo este honor; creo que podemos considerarlo un honor compartido.

Y a todos ustedes, muchas gracias por su atención.

[1] C. P. Snow, *The Two Cultures and the scientific revolution*, (Cambridge University Press, London, 1959)

[2] G. Anders, *Die Antiquiertheit des Menschen* (C. H. Beck, München 1956)

[3] P. Levi, *L'altrui mestiere* (Einaudi, Turín, 1985)

[4] F. Briones Fernández-Pola y A. Hernando-Grande, *Nanociencias: entre la Física y la Biología* (Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, Madrid, 2006).

[5] R. Genovese, *La tribu occidentale. Per una nuova teoría critica* (Bollati Boringhieri, 1995)

[6] I. Calvino, *Lezione americane. Sei proposte per il prossimo millennio* (Garzanti, Milán, 1988)

[7] J. Saramago, *A caverna* (Companhia das letras, 2000)

A PROPOSITO DEL TRÁNSITO DE VENUS DEL 5 DE JUNIO DE 2012

CONCERNING JUNE 5, 2012 VENUS' TRANSIT

A. L. MÉNDEZ BERHONDO

Departamento de Astronomía, Instituto de Geofísica y Astronomía, La Habana, Cuba. ado@iga.cu

Históricamente las observaciones de los tránsitos de Venus y Mercurio han sido de gran interés e importancia en el desarrollo de la Astronomía. A propósito de la observación del tránsito de Venus del pasado 5 de junio de 2012, se da una explicación general de este fenómeno astronómico.

Historically the observations of Venus and Mercury's transit have been of great interest and importance in the development of the Astronomy. Regarding the observation of Venus' transit past June 5, 2012, a general explanation of this astronomical phenomenon is given.

PACS: Celestial mechanics astronomy, 95.10.Ce; Venus, 96.30.Ea; Mercury (planet), 96.30.Dz; Parallaxes (stellar), 97.10.Vm

INTRODUCCIÓN

Entre los múltiples fenómenos astronómicos (ocultaciones, eclipses, conjunciones, etc.) los tránsitos han tenido siempre una especial significación. Se le llama tránsito astronómico al cruce de un astro por la visual entre otros dos. Los tránsitos más notorios son aquellos en los que un astro cruza la visual entre la Tierra y el Sol, siendo únicamente tres los astros que pueden dar lugar a un tránsito de este tipo: la Luna y los dos únicos planetas interiores a la Tierra, Mercurio y Venus. Pero el tránsito de la Luna, debido a las dimensiones angulares (distancias y tamaños aparentes) respectivas de la Luna y el Sol, es un eclipse, en este caso de Sol. De manera que desde la Tierra solamente es posible observar los tránsitos sobre el disco del Sol de Mercurio y Venus. Precisamente el pasado 5 de junio se observó el último tránsito de Venus de este siglo (figura 1). El próximo tránsito ocurrirá en 2016, pero será Mercurio el protagonista (ver tabla I).

De igual manera, se pueden observar tránsitos de satélites sobre el disco de sus respectivos planetas. Los más destacados son los tránsitos de los satélites galileanos sobre el disco de Júpiter (figura 2), pero solamente observables con el uso de potentes telescopios.

La primera observación en Cuba con carácter científico que se tenga noticia ocurrió durante el tránsito de Venus del 6 de diciembre de 1882, cuando el gobierno español envió dos expediciones para observar el fenómeno, una a Puerto Rico y otra a Cuba [1].

CARACTERÍSTICAS PRINCIPALES DE LOS TRÁNSITOS DE MERCURIO Y VENUS

Los tránsitos de Mercurio y Venus fueron fundamentales en

el desarrollo de la Astronomía. Con los primeros tránsitos observados luego de la invención del telescopio (no se tienen reportes de la observación de este fenómeno antes de la era telescópica) se hicieron las primeras estimaciones de la distancia Tierra-Sol a través del cálculo de la paralaje solar o del tiempo en que transcurre el tránsito medido por observadores situados en diferentes latitudes (figura 3). El primer cálculo de un tránsito de Mercurio lo hizo Johannes Kepler, quien pronosticó su ocurrencia para el 7 de noviembre de 1631. Kepler murió un año antes y el tránsito fue observado, según las predicciones de Kepler, por Pierre Gassendi. Kepler también había pronosticado el tránsito de Venus de diciembre de ese mismo año [3].

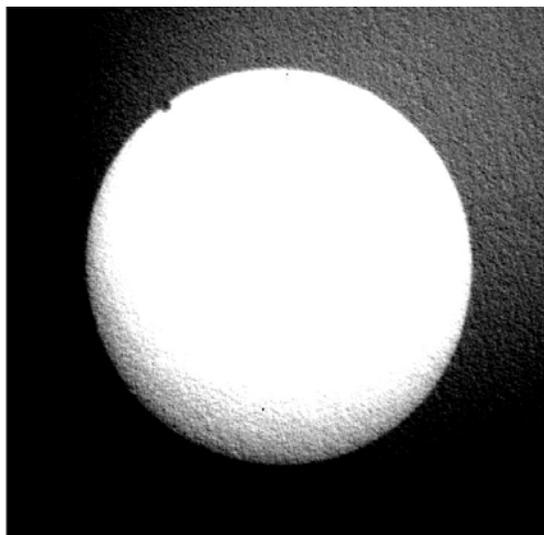


Figura 1 Instantánea del momento en que Venus "entra" al disco solar durante el tránsito del pasado 5 de junio. En el extremo superior izquierdo de la imagen se observa el pequeño círculo negro que es la sombra de Venus proyectada sobre el disco solar. Foto tomada por el autor.

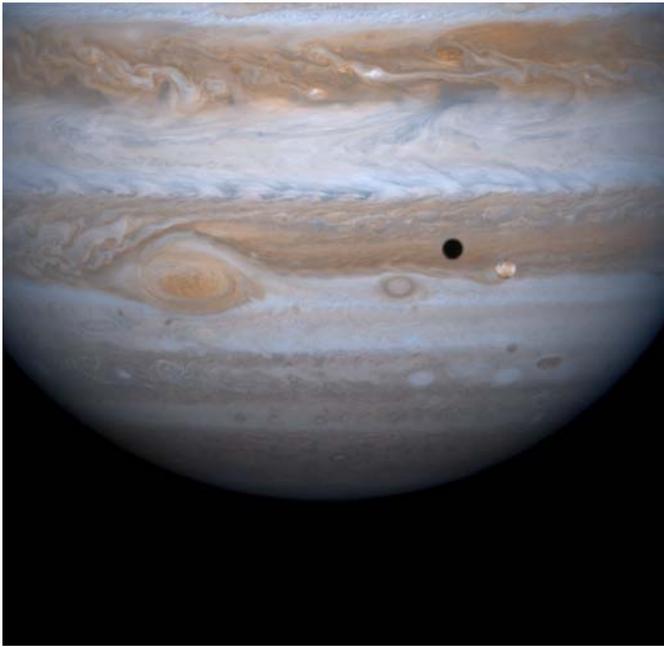


Figura 2: Tránsito de Io, el más próximo al planeta de los satélites galileanos de Júpiter. Nótese la sombra de Io sobre Júpiter (Cassini Imaging Team, Astronomy Picture of the Day: <http://apod.nasa.gov/apod/astropix.html>).

Las primeras estimaciones de la distancia Tierra-Sol a través del cálculo de la paralaje solar se deben a Jeremiah Horrocks. Aprovechando las predicciones de Kepler, quien había pronosticado también un tránsito de Venus para el año 1639, Horrocks recalculó los detalles del tránsito, precisó su ocurrencia para el día 4 de diciembre de ese año y determinó para entonces una distancia Tierra-Sol de 95 millones de km (la distancia real es de 149.58 millones de km) [3].

Mercurio	Venus
9 may. 2016	11 dic. 2117
11 nov. 2019	8 dic. 2125
13 nov. 2032	11 jun. 2247
7 nov. 2039	9 jun. 2255
7 may. 2049	12 dic. 2360
9 nov. 2052	10 dic. 2368

La periodicidad en que ocurren los tránsitos de Mercurio y Venus no es la misma para ambos planetas ni es constante en cada caso, obediendo reglas complicadas. Los tránsitos de Mercurio ocurren con mucho más frecuencia que los de Venus, con una ocurrencia cada 13 o 14 veces por siglo. Esto se debe por tener un período orbital sinódico de tan sólo 115,88 días, mientras que Venus tiene una revolución alrededor del Sol de 583,92 días.

En el caso de Venus, la periodicidad o frecuencia de ocurrencia es más compleja y son de los fenómenos astronómicos predecibles menos frecuentes. Ocurren cuatro tránsitos del planeta dentro de un intervalo de 243 años obediendo un patrón entre tránsitos consecutivos que ha variado. Desde el año 1518, y hasta el 2846, ocurren tránsitos de Venus cada

105.5-8-121.5-8 años, llamándoseles pares a los que ocurren con una separación temporal de 8 años. La variación en el patrón entre tránsitos consecutivos es debida a las perturbaciones gravitatorias que ejercen sobre Venus la Tierra y los planetas jovianos (Júpiter, Saturno, Urano y Neptuno).

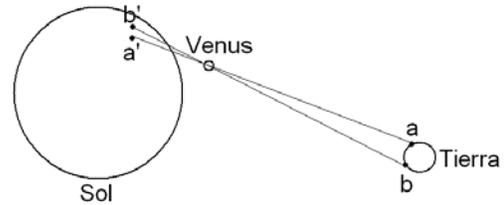


Figura 3. Diferentes observadores en la Tierra (a y b) observan la proyección de Venus sobre diferentes puntos del disco solar (a' y b'). Las distancias y dimensiones de los astros no están a escalas.

Durante los tránsitos de Mercurio, el planeta presenta un diámetro angular de 10" o 12". En el caso de Venus, el astro se presenta con un diámetro aparente de entre 59" y 62". En ambos casos, el tránsito describe una cuerda sobre el disco solar.



Figura 4: Fenómeno de la gota negra.

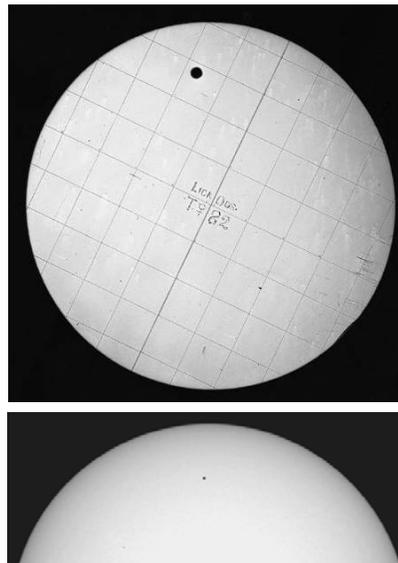
Relacionado con los instantes del primer y último contacto durante un tránsito de Venus, se verifica un fenómeno visual que los astrónomos denominan el fenómeno de la gota negra debido a la forma en que se nos presenta (figura 4). Este fenómeno dificulta la precisión del instante exacto de la entrada y salida del astro en el disco solar y es debido parcialmente a la presencia de la atmósfera del planeta, cuya existencia era desconocida en el pasado.

CONCLUSIONES

Aunque en la actualidad las dimensiones del Sistema Solar se calculan con métodos e instrumentos de alta precisión, y los tránsitos de Mercurio y Venus tiene sólo interés académico, los tránsitos son aún muy utilizados en la exploración y búsqueda de planetas extrasolares. Por otra parte, las observaciones de los tránsitos de Mercurio, permitieron descubrir un fenómeno muy importante para la Física: el avance del perihelio de Mercurio. Esto constituyó un espaldarazo definitorio a la Teoría de la Relatividad.

Como dato curioso, hasta la fecha, en dos ocasiones han ocurrido tránsitos de ambos planetas en un mismo año: 1631 y 1769.

En la figura 5 se muestran imágenes de los tránsitos de Venus y Mercurio de 1882 y 2003 respectivamente.



[1] Benito Viñes-Martorell, Anales de la Real Academia de Ciencias Médicas, Físicas y Naturales de La Habana, **24**, 74 (1887).

[2] NASA Eclipse website: <http://eclipse.gufo.nasa.gov/transit/transit.html>

[3] N. Lomb, *Transit of Venus: 1631 to the present* (New South Publishing, Sydney, 2011).

Figura 5. Tránsitos de Venus (imagen superior) del 6 de diciembre de 1882 y de Mercurio (imagen inferior) del 7 de mayo de 2003.

LOS ESTUDIOS DE FÍSICA EN CUBA CELEBRAN SU MEDIO SIGLO

El pasado 12 de diciembre de 2012, en el Aula Magna de la Universidad de La Habana, tuvo lugar el acto central por los 50 años del nacimiento de la carrera de Física. Presidió la ceremonia el Dr. Gustavo Cobreiro, Rector de la Universidad de La Habana, el Presidente del Centro Latinoamericano de Física (CLAF), Dr. C. Carlos Trallero, y la actual decana de la Facultad de Física, Dra. María Sánchez Colina, quien tuvo a su cargo las palabras centrales, en representación de todos los físicos del país.

Fueron invitados protagonistas de la Reforma Universitaria de 1962 de la cual la carrera de Física es hija, como el Dr. C.

José Altshuler, el presidente de la Sociedad Cubana de Física, Dr. Augusto González, y los ex rectores de la Universidad de La Habana Juan Vela y Armando Pérez. Éste último dirigió unas emotivas palabras a nombre de los fundadores de la carrera de Física, y de varias decenas de profesores de la Facultad de Física y de colaboradores del Instituto de Materiales y Reactivos de la Universidad de La Habana (IMRE), que fueron distinguidos con el Sello “50 Aniversario” por sus 20 años de permanencia –como mínimo– en nuestro claustro.

R. Cuan



La decana de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana, Dra. María Sánchez Colina, abraza a la profesora Teresita Molina –uno de los pilares de la enseñanza de la Óptica en Cuba durante décadas. A la izquierda de la decana, el Rector de la Universidad de La Habana, Dr. Gustavo Cobreiro y, a su izquierda, el presidente del CLAF, Dr. C. Carlos Trallero. La escena tuvo lugar durante el acto por el quincuagésimo aniversario del nacimiento de la carrera de licenciatura en Física en Cuba, celebrado en el Aula Magna de la Universidad de La Habana, el pasado 12 de diciembre de 2012 (Foto: Beatriz Rodríguez Hernández).

LOS MEDIOS CELEBRAN EL CUMPLEAÑOS 50 DE LA CARRERA DE FÍSICA

El flamante “Salón InfoTecnológico” de la Universidad de La Habana dio un nuevo sentido a su nombre el pasado miércoles 5 de diciembre de 2012, al acoger una conferencia de prensa sobre los logros de la carrera de Física durante 50 años. Cerca de una docena de periodistas de los principales medios de difusión nacionales los conocieron de primera mano, en voz de la decana de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana, María Sánchez Colina, la vicedecana Aimé Peláiz, el ex-decano Osvaldo de Melo, la profesora Elena Vigil, y el joven profesor Aliezer Martínez.

Ll. Uranga
Facultad de Física
Universidad de La Habana



Conferencia de prensa del pasado miércoles 5 de diciembre. De frente, y de izquierda a derecha, los doctores Aimé Peláiz, María Sánchez Colina, Elena Vigil, Osvaldo de Melo y Aliezer Martínez.

...Y LA SOCIEDAD CUBANA DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS CUMPLE 70

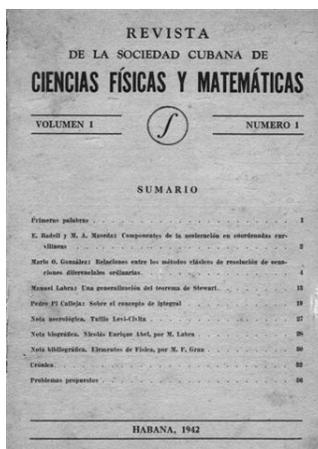
Justo a las 2 PM del 31 de octubre de 2012, comenzó, en el Aula Magna de la Universidad de La Habana, un acto solemne para conmemorar los 50 años de la creación de la Carrera de Licenciatura en Matemática en Cuba y el septuagésimo cumpleaños de la creación de la Sociedad Cubana de Ciencias Físicas y Matemáticas. Sus principales artífices fueron los ilustres profesores de la Universidad de La Habana, Pablo Miquel y Manuel F. Gran, formadores de varias generaciones de matemáticos y físicos cubanos, y promotores de la investigación científica y la enseñanza de la Física y la Matemática en nuestro país, fundamentalmente durante la primera mitad del siglo XX. El acto estuvo presidido por el Ministro de Educación Superior, Dr. C Rodolfo Alarcón, la Dra. C Hilda León (rectora en funciones de la UH) y el Dr. C Luis Ramiro Piñeiro, Decano de la Facultad de Matemática y Computación, y Presidente de la Sociedad Cubana de Matemática y Computación.

En el mismo participaron personalidades vinculadas a la

Sociedad Cubana de Matemática y Computación, a la Sociedad Cubana de Física, los miembros de sus Juntas Directivas, directores de instituciones científicas, los ministerios de Educación y Educación Superior y de la ACC, junto a profesores, estudiantes y egresados de las carreras de Física y Matemática.

Asistió como invitado especial y fue objeto de un reconocimiento el Dr. José Altshuler, por su papel en la Reforma Universitaria que dio lugar a la creación de las carreras de Física y Matemática en 1962. También fueron reconocidos un destacado grupo de egresados de las primeras cinco graduaciones de matemáticos, que han jugado un importante papel en el desarrollo de la Matemática a lo largo de todo el país.

Luis Ramiro Piñeiro
Decano
Facultad de Matemática y Computación
Universidad de La Habana



A la izquierda, una vista del Aula Magna durante el acto solemne para conmemorar los 50 años de la creación de la Carrera de Licenciatura en Matemática en Cuba, y el 70 cumpleaños de la fundación de la Sociedad Cubana de Ciencias Físicas y Matemáticas, celebrado el 31 de octubre de 2012. A la derecha, cubierta del primer número de la revista de la Sociedad Cubana de Ciencias Físicas y Matemáticas, fundada el 25 de febrero de 1942 en el Instituto de Santiago de Cuba. Entre los fundadores de la Sociedad estuvieron varias personalidades que dieron impulso a la Física en Cuba durante largos años, como Manuel F. Gran, Rafael Fiterre, Ángel Álvarez-Ponte y Roberto Soto del Rey. (Imágenes: L. R. Piñeiro y J. Altshuler).

EL PRIMER DIPLOMA DE INGENIERÍA FÍSICA DE LA UNIVERSIDAD DE LA HABANA LO DEFENDIÓ UNA MUJER

“Sistema para la detección de pulsos mecánicos mediante un sensor piezoeléctrico” es el título de la primera tesis de graduación en la carrera de Ingeniería Física en la Universidad de La Habana, cuya defensa comenzó exactamente a las 10:30 AM del 8 de junio del 2012. Su autora, Yalina García, no vaciló en presentar ante el tribunal el “chirimbolo” (o sea, un prototipo construido por ella misma) además de explicar convincentemente su funcionamiento, y responder adecuadamente las preguntas del oponente Ormani García, y de los miembros de un tribunal compuesto por los físicos Ernesto Altshuler y Reinaldo Font, y por el ingeniero Gustavo Sánchez-Colina. La tutoría corrió a cargo de Aimé Peláiz y Ariel Santana, –todos miembros del claustro de la Facultad de Física.

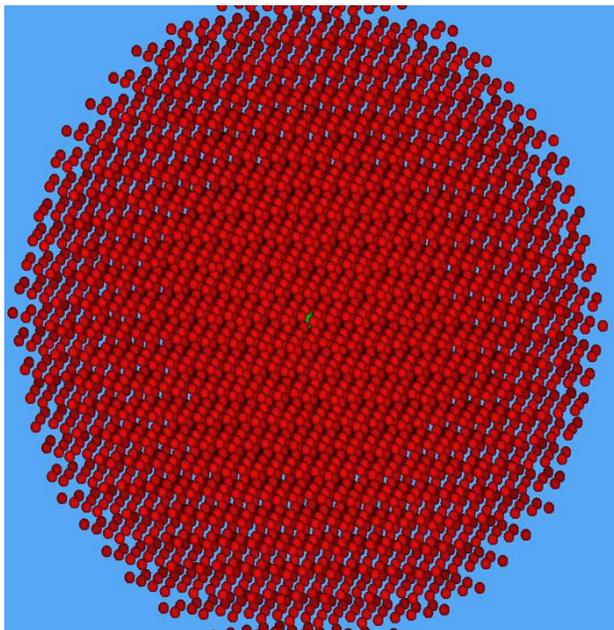
E. Altshuler



Defensa de la primera tesis de Diploma de Ingeniería Física de la Universidad de La Habana, el día 8 de junio de 2012. A la izquierda, de pie, Yalina García (Foto: E. Altshuler).

JESÚS RUBAYO Y ROBERTO MULET MOVIERON LOS HILOS DE OTRA “RACHA TEÓRICA”

Un largo apagón en áreas de la Universidad de La Habana no impidió que se realizaran exitosamente tres defensas de doctorado el día 3 de julio de 2012. La primera, a cargo de Pedro Pajón (InSTEC) llevaba por título “Potenciales intermoleculares en complejos de monóxido de nitrógeno: estructura y dinámica en base a primeros principios”, tutorada por los doctores Ramón Hernández-Lamonedá (México) y Jesús Rubayo-Soneira (InSTEC). Éste último fue también tutor de “Adsorción de hidrógeno molecular en espumas de carbono”, defendida por Aliezer Martínez (Universidad de La Habana). La única tesis experimental de la temporada, “Efecto de la orientación de las fronteras de grano sobre las propiedades de transporte intergranular en superconductores cerámicos $\text{Bi}_{1.65}\text{Pb}_{0.35}\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10+d}$ ”, fue defendida por Iván García-Fornaris (Universidad de Granma), bajo la tutoría de Ernesto Govea-Alcaide (Universidad de Oriente) y Pedro Muné-Bandera (Universidad de Oriente).



El día 5 de julio se defendieron dos doctorantes supervisados por Roberto Mulet (Universidad de La Habana). El primero, Alejandro Lage (Universidad de La Habana) defendió el trabajo “Método variacional de clusters en sistemas desordenados de dimensión finita”, mientras que Rogelio Díaz defendía exitosamente la tesis “Procesos dinámicos y cuasiestacionarios en sistemas magnéticos de bajas dimensiones”.

El 9 de julio la única fémina de la temporada, Llinersy Uringa (Universidad de La Habana) –también supervisada por Jesús Rubayo-Soneira– defendía exitosamente la tesis “Estudio del reordenamiento estructural de matrices de neón dopadas con NO: dinámica molecular cuántica”. La defendida se identifica en la foto de grupo del evento WAMP’2012 incluido en esta sección de noticias, por su vestido de color rosa. Su tesis fue seleccionada como la más destacada defendida por un joven en 2012, según criterio de la Sección de Ciencias Naturales de la Comisión de Grados Científicos de la Universidad de La Habana.

E. Altshuler

Matriz de unos 4200 átomos de Ne en cuyo centro se encuentra una impureza de NO (apenas visible en la figura como una región verde: ver versión electrónica). La ilustración ha sido tomada de la tesis de doctorado “Estudio del reordenamiento estructural de matrices de neón dopadas con NO: dinámica molecular cuántica”, defendida por Llinersy Uringa (Facultad de Física, Universidad de La Habana) el 9 de julio de 2012. La autora realizó un estudio puramente cuántico de la respuesta dinámica del medio alrededor de la impureza, al excitar esta última a su primer estado de Rydberg. Para reducir la dimensionalidad del sistema, se propuso un modelo de capas debido a la débil anisotropía del potencial NO-Ne en el estado excitado. Este cluster de átomos de Ne permite simular los primeros 2 picosegundos de la dinámica del sólido real pues se puede garantizar que en este intervalo la perturbación todavía no ha llegado a la frontera.

ENFIQUI EN MATANZAS

La Universidad de Ciencias Pedagógicas “Juan Marinello” de Matanzas, con el auspicio de las Sociedad Cubana de Física y de la Red Latinoamericana de Enseñanza de la Física y la Química, organizó el IX Taller Internacional sobre la Enseñanza de la Física y la Química (ENFIQUI), del 12 al 16 de junio de 2012.

El mismo constó de cursos, conferencias y simposios relacionados con las temáticas siguientes: La dirección del proceso enseñanza-aprendizaje de la Física y la Química, la evaluación del aprendizaje de los estudiantes, el trabajo con alumnos talentosos, la motivación en la enseñanza de la Física

y la Química, el desarrollo de la creatividad de los estudiantes a través de las clases de Física y Química, la formación y superación del profesor de Física y Química, y el uso de la TIC, entre otros temas.

Participó un total de 47 personas, entre las que figuraron visitantes de Panamá, Colombia, República Dominicana, México, España, y Venezuela.

Moltó

UN DECENIO DE FISICA Y MÚSICA: MÁS ALLÁ DE LA CORNETA CHINA

A pesar de ser el inventor de la “corneta china digital”, nadie dudaría en aceptar que el principal aporte del Dr. Daniel Stolik a la música cubana es la creación de la Cátedra de Física y Música de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana, que gracias a su enorme entusiasmo ha llegado este año a su décimo aniversario.

Creada por resolución rectoral No. 765/2001, la Cátedra fue inaugurada oficialmente en el marco del evento “Primavera en La Habana”, del Laboratorio Nacional de Música Electroacústica, en marzo del 2002.

Dedicada a explorar la relación entre la Física y la Música, la Cátedra ha contribuido a develar la rica relación entre la Ciencia y el Arte –un tema poco común en el ámbito nacional– mediante una incansable labor pedagógica, divulgativa e investigativa, que se ha visto secundada por el Dr. Alejandro Durán, del IMRE (Universidad de La Habana).

En la Cátedra se han impartido cada año cursos y conferencias de distintos niveles:

- Elemental, con muy poco tratamiento matemático (para público en general).
- Medio, que se basa en los conocimientos físicos y matemáticos de nivel de preuniversitario.
- Superior, para graduados universitarios.

Los cursos y conferencias abarcan un enorme rango de temas, que van desde matemática y física elementales, hasta las escalas musicales y las Nuevas Tecnologías en la composición musical, pasando por el análisis del aporte a la música de una pléyade de físicos de renombre: desde Galileo y Bernoulli, hasta Einstein y Feynman. Como consecuencia natural de esta labor, el profesor Stolik ha creado un texto (por el momento en versión electrónica), una multimedia, 7 videos temáticos, varios artículos en revistas especializadas, y uno de carácter divulgativo en la revista “Bohemia”.

Durante un decenio, la Cátedra ha tenido una influencia sustancial sobre múltiples instituciones cubanas: El Instituto Cubano de la Música, el Instituto Superior de Arte, la Escuela Nacional de Arte, El Laboratorio Nacional de Música

Electroacústica, el Centro de Desarrollo e Investigaciones de la Música Cubana, el Museo de la Música, La Fábrica de Instrumentos Musicales, y el Centro de Neurociencias, entre otras.



El Dr. Stolik, Presidente de la Cátedra de Física y Música de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana, en los estudios de CIMATEL, trabajando en la edición de una multimedia de Física y Música.

Como botón de muestra de las actividades de la cátedra en los últimos tiempos, podemos decir que, en el 2011, además de impartir un curso de Física y Música y no menos de 5 conferencias especializadas, el profesor Stolik ha compuesto 25 temas musicales para el DVD “Recorra Cuba, la Habana Vieja” editado por CITMATEL. La celebración del décimo aniversario de la Cátedra, en este año 2012, ha ido igualmente a un paso alucinante: seminarios, cursos e intercambios científicos han tenido lugar no sólo en Cuba, sino en el IPN (México), el CINVESTAV (México DF), y la UAM (España).

Terminamos invitando a nuestros lectores a revisar el artículo del profesor Stolik titulado “Física y Música: del timbre a lo desconocido” (Rev. Cub. Fis. **29**, 37 (2012)), que se puede descargar del sitio web de nuestra revista.

E. Altshuler

SEGUNDO TALLER CUBA FV

El Palacio de las Convenciones de La Habana acogió, el miércoles 28 de noviembre de 2012, el segundo taller CUBA FV (Cuba fotovoltaica), en el marco de la 16 Conferencia Científica de Ingeniería y Arquitectura (16 CCIA) de la CUJAE. Durante el apretado programa, miembros de instituciones académicas y de la industria presentaron ponencias y debatieron sobre el uso

presente y futuro de la Energía Fotovoltaica en Cuba.

Daniel Stolik
Comité Organizador
2^{do} Taller CUBA FV

FÍSICA EN LA PLAYA

El ambiente playero del hotel “Brisas del Caribe”, en Varadero, no afectó para nada el alto nivel científico del Segundo Taller de Física Atómica y Molecular (WAMP 2012), que tuvo lugar entre el 10 y el 13 de julio de 2012. Contó con la participación de 25 cubanos y 18 extranjeros, donde se destacó la participación de Francia (13 participantes de 5 universidades). Fue un resultado natural de la tradición, desarrollo y prestigio de Francia en este campo de la Física. El taller, segundo de su tipo desarrollado en Cuba, sirvió de marco propicio para el intercambio científico constante, durante tres días, entre profesores destacados en este campo del saber y jóvenes profesionales cubanos. El primero tuvo lugar en La Habana en enero de 2009, en las instalaciones del InSTEC.

El evento contó con destacadas personalidades en el campo de la Física Atómica y Molecular como el Profesor John

Maier, reconocido científico de la Universidad de Basel, Suiza. En el taller se presentaron 21 conferencias plenarias, 5 contribuciones orales y 11 carteles.

Las instituciones cubanas representadas fueron el InSTEC, Universidad de la Habana, ICIMAF y Universidad de Pinar del Río.

Las universidades francesas de Lille y Le Havre, contribuyeron con un modesto apoyo material al evento, lo cual fue de importancia capital para la asistencia de jóvenes cubanos. Es de lamentar que la IUPAP no respondió a nuestra petición de apoyo financiero.

Jesús Rubayo Soneira (InSTEC)
E. Altshuler



Participantes en WAMP' 2012

PARTICIPACIÓN CUBANA EN LA OLIMPIADA IBEROAMERICANA DE FÍSICA 2012: TRES, DOS, UNO... ¿CERO?

La participación cubana en la XVII Olimpiada Iberoamericana de Física del 2012 no pudo ser más pequeña, pero difícilmente más eficiente: se obtuvo financiamiento para llevar un estudiante acompañado de un profesor, pero nuestro competidor logró llegar hasta la “antesala del oro”. Según el entrenador José Manuel Mora (IPVCE “Carlos Marx” de Matanzas) nuestro único representante, el estudiante avileño Alejandro Alfonso, obtuvo una medalla de plata, y el lugar 12 en el escalafón general de la Olimpiada.

El evento tuvo lugar en Granada, España, del 17 al 22 de septiembre, y para su financiamiento han sido cruciales las gestiones de la Sociedad Cubana de Física, al conseguir que el ICTP financiara un pasaje. El Presidente de la Sociedad Cubana de Física, Dr. Augusto González, y la decana de la Facultad de Física, Dra. María Sánchez-Colina, han sostenido conversaciones con la Viceministra del Ministerio de Educación Margarita Mc Pherson, para discutir la crítica situación existente para mantener la participación de Cuba en las olimpiadas de Física.



¿Cuál es la densidad del jugo de manzana? Este fue el primer problema experimental de la XVII Olimpiada Iberoamericana de Física, donde el único participante cubano, el avileño Alejandro Alfonso, obtuvo medalla de plata (Foto bajada de <http://physica.ugr.es/oibf2012/>)

E. Altshuler

UN VIEJO ANHELO CUMPLIDO: TENDREMOS ACCESO A LAS REVISTAS DE LA APS

Nicoletta Zar, del eJDS, Trieste ha anunciado que la American Physical Society (APS) otorgó acceso en línea a Cuba a sus revistas.

editoriales, y por la SCF, Aurora Pérez. Las universidades e institutos cubanos pueden registrarse en:

<http://peri.inasp.info/peri/peri.pl?cid=53&pid=37>

Tras varios meses de “lobby” desde varios frentes, el otorgamiento ha tenido lugar tras una conferencia en Junio de 2012 en el ICTP, donde se celebró el décimo aniversario del programa eJDS, a la cual asistieron representantes de las

Augusto González

¡...Y EL TRANSITO DEL PLANETA VENUS SE VIO TAMBIÉN EN ORIENTE!

Mientras que los astrónomos habaneros obtenían fotos del tránsito del planeta Venus por la eclíptica solar ocurrido el día 5 de junio de 2012, un entusiasta grupo de físicos (más un ingeniero) de la región oriental del país realizaban sus propias observaciones sobre el acontecimiento. La foto que se muestra fue tomada desde la azotea del rectorado de la Universidad de Oriente exactamente a las 18:27:54 hora de Cuba (22:27:54 UTC), con una cámara digital comercial acoplada a un telescopio. El promotor principal de la actividad fue el Dr. Jorge del Pino-Boytel, con una vasta experiencia en el rastreo

de satélites artificiales. También participaron el Ing. Eduardo Roca-Oria, el MSc. Alexey Cruz-García, el recién graduado de Física Reinier Ladrón de Guevara, y los estudiantes de la Universidad de Oriente Guillermo Palacios-Roque (4to año) y Yaumel Arias (3er año).

Alexey Cruz
Universidad de Oriente



El eclipse, visto desde oriente. Panel izquierdo: de izquierda a derecha en la fila delantera, Renier Ladrón de Guevara, Jorge del Pino Boytel y Eduardo Roca-Oria. En la fila trasera, Alexey Cruz y Guillermo Palacios-Roque. A la derecha, Venus se reporta sobre el disco solar exactamente a las 18:27:54 horas del día 5 de junio de 2012. La imagen fue tomada desde la azotea del edificio del Rectorado de la Universidad de Oriente por el equipo de la izquierda (Foto: Yaumel Arias).

OTRO RECONOCIMIENTO INTERNACIONAL PARA UNA FÍSICA CUBANA

La Academia de Ciencias del Caribe (CAS) de conjunto con la TWAS, ha otorgado el “Young Scientist Award 2012” a Aimé Peláiz, por su “importante contribución al estudio de los Materiales Ferroeléctricos”. Otro merecido reconocimiento a la Vicedecana Docente de la Facultad de Física de la

Universidad de La Habana.

María Sánchez-Colina

