

FÍSICA

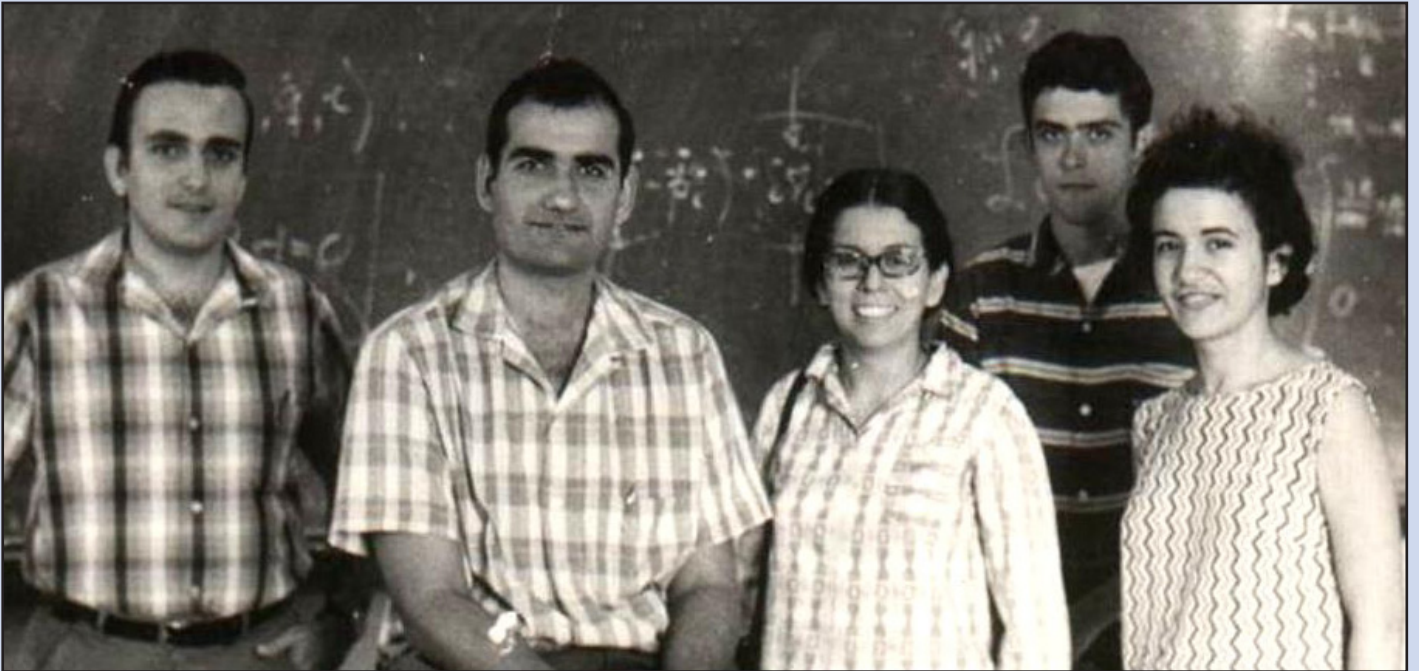
REVISTA CUBANA DE FÍSICA

FÍSICA

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

VOL.30 No.2
DICIEMBRE, 2013

UNA SONRISA DE MEDIO SIGLO



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.edu.cu

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

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

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

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

C. A. ZEN-VASCONCELOS
Univ. Federal Rio Grade du Sul
cesarzen@cesarzen.com

J. O. FOSSUM
NTNU, Trondheim
jon.fossum@ntnu.no

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

PORTADA: Panel Superior: E. Vigil y colegas de la Escuela de Física de la Universidad de La Habana en 1968. Panel inferior: entrega del Premio Nacional de Física a E. Vigil el 28/10/2013

* Artículos presentados en el VII Taller internacional TECNOLÁSER y III Reunión de Óptica, Vida y Patrimonio (La Habana, abril de 2012)

COORDENADAS

- 58 **LA FÍSICA EN LA ENSEÑANZA MEDIA CUBANA: APRENDIENDO A ANDAR DE NUEVO**
[PHYSICS IN CUBAN MID-SCHOOL TEACHING: LEARNING TO WALK AGAIN]
E. Moltó y E. Altshuler

ARTÍCULOS ORIGINALES

- 60 **SPECKLE PATTERNS AND 2-DIMENSIONAL SPATIAL MODELS**
[PATRONES MOTEADOS Y MODELOS ESPACIALES BIDIMENSIONALES]
J. R. Smith, J. J. Llovera-González and S. P. Smith (Ed. E. Altshuler)
- 66 **ESTUDIO TEÓRICO DEL MECANISMO ELEY-RIDEAL EN LA RECOMBINACIÓN DE NITRÓGENO SOBRE TUNGSTENO(110)**
[THEORETICAL STUDY OF ELEY-RIDEAL MECHANISM ON NITROGEN RECOMBINATION OVER TUNGSTEN(110)]
E. Quintas-Sánchez, P. Larrégaray, C. Crespos y A. Pérez-Mellor (Ed. A. J. Batista-Leyva)
- 72 **BUTYRIC ACID INTERACTION WITH CARBON NANOTUBES: MODELLING BY A SEMI-EMPIRICAL APPROACH**
[UNA APROXIMACIÓN SEMI-EMPÍRICA A LA MODELACIÓN DE LA INTERACCIÓN ENTRE ÁCIDO BUTÍRICO Y NANOTUBOS DE CARBONO]
M. J. Al-anber (Ed. E. Altshuler)
- 77 **SOBRE LA HABITABILIDAD DE EXOPLANETAS ORBITANDO A PRÓXIMA DEL CENTAURO**
[ON THE HABITABILITY OF EXOPLANETS ORBITING PROXIMA CENTAURI]
M. López-Águila, R. Cárdenas-Ortiz y L. Rodríguez-López (Ed. E. Altshuler)
- 81 **POSSIBILITIES OF LIFE AROUND ALPHA CENTAURI B**
[POSIBILIDADES DE VIDA ALREDEDOR DE ALFA CENTAURO B]
A. González, R. Cárdenas and J. Hearnshaw (Ed. C. A. Zen-Vasconcelos)
- 84 **LASER-INDUCED FLUORESCENCE: APPLICATION TO SPECTROSCOPY AND NEW MICROSCOPY IMAGING METHODS***
[FLUORESCENCIA INDUCIDA POR LASER: APLICACIÓN A LA ESPECTROCOPIA Y NUEVOS MÉTODOS DE IMAGINERÍA MEDIANTE MICROSCOPIA*]
J. -P. Galaup (Ed. V. Fajer y J. Ravelo)
- 89 **A CAPACITIVE BIOELECTRODE FOR RECORDING ELECTROPHYSIOLOGICAL SIGNALS***
[UN BIOELECTRODO CAPACITIVO PARA MEDIR SEÑALES ELECTROFISIOLÓGICAS*]
E. Moreno-García, S. Mujica, J. M. de la Rosa-Vázquez, S. Stolik-Isakina (Ed. V. Fajer y J. Ravelo)
- 93 **DESARROLLO DE UN ESPECTRÓMETRO DE DIFRACCIÓN Y SU PROGRAMA DE CONTROL UTILIZANDO ELEMENTOS COMERCIALES DE BAJO COSTO***
[DEVELOPMENT OF A DIFFRACTION SPECTROMETER AND ITS CONTROL PROGRAM USING COMMERCIAL, LOW-COST ELEMENTS*]
O. Ormachea, O. Urquidi y J. Cisneros (Ed. V. Fajer y J. Ravelo)
- 99 **MEDICIÓN REMOTA DE OZONO EN TUXTLA GUTIÉRREZ, CHIAPAS, MÉXICO, UTILIZANDO LA TÉCNICA DOAS***
[OZONE REMOTE MEASUREMENT IN TUXTLA GUTIÉRREZ, CHIAPAS, MEXICO, USING THE DOAS TECHNIQUE*]
C. Lara-García, H. Nájera-Aguilar, J. Camas-Anzueto y S. Mendoza-Vázquez (Ed. V. Fajer y J. Ravelo)
- MOMENTOS DE LA FÍSICA EN CUBA**
- 103 **DUODÉCIMO GRADO EN LA UNIVERSIDAD DE LA HABANA: ¿PALIATIVO, O ESTRATEGIA DEFINITIVA?**
[TWELFTH DEGREE AT THE UNIVERSITY OF HAVANA: PALLIATIVE, OR FINAL STRATEGY?]
R. Fundora-Arencibia, R. M. Calderón-Arios (Ed. E. Altshuler)
- PARA FÍSICOS Y NO-FÍSICOS**
- 109 **THE HIGGS PARTICLE: WHAT IS IT, AND WHY DID IT LEAD TO A NOBEL PRIZE IN PHYSICS?**
[LA PARTÍCULA DE HIGGS: ¿QUÉ ES, Y POR QUÉ CONDUJO A UN PREMIO NOBEL EN FÍSICA?]
W. Bietenholz (Ed. E. Altshuler)
- 113 **NUESTRA FÍSICA EN NOTICIAS**

LA FÍSICA EN LA ENSEÑANZA MEDIA CUBANA: APRENDIENDO A ANDAR DE NUEVO

PHYSICS IN CUBAN MID-SCHOOL TEACHING: LEARNING TO WALK AGAIN

E. Moltó*
E. Altshuler

La enseñanza de la Física en la Secundaria Básica y el Preuniversitario en Cuba pasó del esplendor a la oscuridad durante los últimos 20 años. Afortunadamente, en la actualidad se están comenzando a realizar ciertas transformaciones y a proyectar otras, que esperamos devuelvan a la Física en la educación media parte de su antiguo lustre.

Ante todo, es menester recordar que la *Secundaria Básica* cubana agrupa los grados séptimo, octavo y noveno, y la cursan todos los jóvenes, mientras que el *Preuniversitario* comprende los grados décimo, oncenno y duodécimo, y lo cursan quienes aspiran a ingresar en el nivel universitario.

El curso de Física de la Secundaria Básica tenía un total de 210 horas divididas en 105 horas para el octavo grado y 105 horas para el noveno grado en el comienzo del primer lustro de la década de los 90 del pasado siglo. En esa época, se contaba con un libro de texto para cada grado. Este libro se encontraba didácticamente bien elaborado, tenía un conjunto de problemas resueltos o ejemplos y tareas suficientes para el estudiante, dosificadas y en relación sistémica con los problemas resueltos o ejemplos que presentaba. El libro de texto también incluía prácticas de laboratorio dirigidas tanto a estudiantes como a profesores. El profesor de Física le daba todas las clases al estudiante y era el dirigente directo de su aprendizaje en este nivel. Todas las escuelas de Secundaria Básica del país poseían laboratorios docentes de Física equipados, lo que permitía la realización de las prácticas de laboratorio y demostraciones experimentales planteadas en los textos. Además, las escuelas tenían una cobertura docente total de profesores de Física.

En el caso del Preuniversitario, el curso de Física incluía 400 horas repartidas así: 84 en décimo grado, 126 en oncenno grado y 190 en duodécimo grado. La cobertura y función de los profesores, así como la situación de los laboratorios docentes y libros de texto era tan buena como en Secundaria Básica. Cerca de la culminación de este nivel existía una prueba de ingreso de Física que debía ser aprobada por los estudiantes que aspiraban a cursar las carreras universitarias de ciencias exactas e ingeniería. Gran parte del tiempo del grado duodécimo se dedicaba a la preparación para este examen de ingreso. El tener que prepararse y aprobarlo, garantizaba que los estudiantes que ingresaban en las referidas carreras poseyeran una buena preparación en Física.

Los profesores de Física, tanto de Secundaria Básica como de Preuniversitario, eran graduados de Licenciatura en Educación de la especialidad de Física, que se cursaba en las universidades pedagógicas. Su formación académica descansaba en la Física, la Matemática, y la Didáctica de la Física. Además, durante los cinco años que duraba esta formación profesional, el futuro profesor pasaba primero por una práctica de familiarización en el aula, y posteriormente, se situaba al frente de un grupo en cada nivel de educación enseñando Física bajo la dirección de un tutor por la escuela y otro por la universidad. Además, estas universidades contaban con laboratorios docentes de Física bien equipados, lo que permitía que los egresados recibieran una adecuada formación experimental.



El "Pre Saúl" se viste de azul. Como parte de las nuevas medidas tomadas para reanimar la enseñanza media cubana, se han reabierto en los últimos años varios institutos preuniversitarios en las ciudades, como es el caso del preuniversitario "Saúl Delgado", en el barrio de El Vedado, en La Habana. (Foto: E. Altshuler)

Existía un *metodólogo* a nivel de municipio, provincia y nación para cada uno de los mencionados niveles educativos, que coordinaba y supervisaba las acciones asociadas a la enseñanza de la Física. También existía una *Comisión Nacional de Física* formada por prestigiosos educadores de esta ciencia, que se ocupaba de revisar y dar el visto bueno para la aprobación por parte del Ministerio de Educación de todos los programas, libros de texto y otros materiales didácticos que se elaboraban para la enseñanza de la Física en los referidos niveles.

Este sistema permitía garantizar una buena apropiación de los contenidos de Física por parte de los estudiantes al concluir la educación media. Esto lo avalaban los resultados de las pruebas estatales realizadas al final del curso de Física de cada nivel y de los exámenes de ingreso mencionados. En los últimos años de este

* Instituto Superior Pedagógico "Enrique José Varona"

período, el total de aprobados en el examen de ingreso superaba cada año el 80%. En el caso de los exámenes estatales, el 90%.

Esta bonanza en la enseñanza de la Física comenzó a resquebrajarse a partir del final del primer lustro de la década de los 90 del pasado siglo hasta llegar a un estado deplorable a fines de la primera década del presente siglo. A continuación explicaremos el por qué de este calificativo.

A comienzos de la última década del siglo XX –donde se agudizó al máximo la crisis económica del país– más del 70% de los profesores de Física de la educación media abandonaron las aulas, entre otras causas, para pasar a trabajar a otros sectores mejor remunerados. También influyó el traslado hacia el campo de la casi totalidad de los centros de enseñanza preuniversitaria, y la orientación de que los profesores de secundaria impartieran todas las asignaturas con el apoyo de clases grabadas en videocassettes. El consiguiente déficit de profesores trajo como consecuencia la instauración de un plan de emergencia de formación de maestros para el nivel medio, los cuales asumían las aulas con una pobre preparación. Aún así, en muchos centros se incumplían los programas por falta de profesores. Además, se eliminó la realización de prácticas de laboratorio por parte de los alumnos y las demostraciones experimentales se conocían sólo a través del televisor. Esto llevó a la conversión de los laboratorios de Física en aulas y a la pérdida o deterioro del equipamiento correspondiente. Finalmente, la Física desapareció como asignatura independiente en la Secundaria Básica, y pasó a formar parte de una asignatura denominada *Ciencias Naturales*, en la cual el tiempo para los contenidos de Física se redujo drásticamente respecto al asignado en épocas anteriores. Adicionalmente, se eliminó la prueba de ingreso de Física en el caso del Preuniversitario, y en los dos niveles se eliminó la realización de los exámenes estatales medios, de tal suerte que la nota del estudiante se basaba fundamentalmente en el criterio del profesor. Como colofón, se eliminaron los metodólogos de Física del nivel medio y la referida Comisión Nacional de Física.

Se dejaron de formar profesores de Física de nivel medio en las Universidades Pedagógicas. En el caso de la Secundaria Básica se pasó a formar un llamado *Profesor General Integral* para impartir todas las asignaturas siguiendo las pautas anteriormente explicadas. El tiempo de Física que requería el profesor en esta modalidad era tan sólo de 40 horas lectivas. En el caso de Preuniversitario, se pasó a formar un profesor de Matemática, Física e Informática en una modalidad llamada *Municipalización*. Este profesor se formaba recibiendo la mitad del tiempo de preparación de antaño y sin la realización de prácticas de laboratorio, al no existir laboratorios de Física en los locales municipales donde se daban las clases. En realidad, este lúgubre escenario no sólo afectaba a la Física, sino a todas las asignaturas en los diferentes niveles.

Este estado de cosas fue señalado, durante años, por amplios sectores de la población y por varias instituciones, entre las que destaca la Sociedad Cubana de Física. A partir de 2012, la dirección del país ha comenzado a impulsar un conjunto de transformaciones en la enseñanza media, que incluyen a la Física.

Entre las principales transformaciones en la enseñanza de la

Física realizadas, o en proceso de realización, están las siguientes. La Física ha vuelto a ser una asignatura independiente en la Secundaria Básica con un total de 170 horas –un tiempo aún insuficiente en nuestra opinión, pero que constituye una mejora sustancial respecto al escenario previo. Se dan los primeros pasos para la conformación de nuevos programas de estudio, libros de texto y otros materiales didácticos para la enseñanza media a partir del curso 2014 – 2015 bajo la supervisión de la *Comisión Nacional de Física*, la cual ha vuelto a existir con las funciones que tenía. Esto permitirá un incremento de tiempo en los cursos de Física y una actualización de los mismos, tanto en contenido, como en la didáctica. También se ha revitalizado la existencia de metodólogos que atienden la asignatura Física.

Todas las escuelas Secundarias Básicas y Preuniversitarios del país están recibiendo equipamiento de origen chino para la realización de las prácticas de laboratorios de Física; se han habilitado locales para estos laboratorios y se prepara a los profesores de Física de los referidos niveles educativos para la utilización de este equipamiento en las clases. Se ha aprobado también la plaza de un *técnico de laboratorio* de Física para cada escuela, que está en proceso de preparación.

Muchos institutos preuniversitarios han regresado a las ciudades, lo que ha traído consigo la vuelta de muchos profesores de Física a las aulas, que se ha traducido en un alto nivel de cobertura de docentes de Física en la mayor parte de las provincias del país. Para la preparación de los docentes de Física de los mencionados niveles se están impartiendo diplomados y se han elaborados materiales didácticos.

Se ha vuelto a formar un profesor de Física para el nivel medio en las Universidades Pedagógicas con nuevos programas de estudio en los que se vinculan sistémicamente lo académico con lo laboral. Estas universidades se han dotado de nuevo equipamiento de laboratorio de Física. Se están elaborando nuevos libros de textos de Física y Didáctica de la Física para formar esos profesionales, que también tienen a su disposición textos universitarios clásicos reconocidos internacionalmente.

Se han vuelto a aplicar exámenes estatales de Física para los grados terminales de la Secundaria Básica y el Preuniversitario. Como medida temporal, pero efectiva, los estudiantes que aspiran a estudiar la carrera de Física, y de profesor de Física, cursan el grado duodécimo en la universidad, lo que permite una mejor preparación en esta asignatura, y una familiarización con su futuro centro de formación profesional.

¿Seremos capaces, con estas nuevas medidas, de recuperar la calidad que tenía la enseñanza de la Física en el nivel medio cubano hace dos décadas? Podríamos formular una pregunta similar no sólo en este, sino en múltiples terrenos de una sociedad que se vio sacudida violentamente en la última década del pasado siglo, y que hoy lucha por recuperarse. Responderla, naturalmente, no resulta cosa sencilla. Pero sólo poniendo las cartas sobre la mesa podremos contribuir a que la Física –apenas otro grano de arena en la montaña de la nación– aprenda a andar de nuevo.

SPECKLE PATTERNS AND 2-DIMENSIONAL SPATIAL MODELS

PATRONES MOTEADOS Y MODELOS ESPACIALES BIDIMENSIONALES

J. R. SMITH^{a†}, J. J. LLOVERA-GONZALEZ^{b‡}, S. P. SMITH^{c+}

a) University of California at Davis, Davis, California, USA 95616. smith@physics.ucdavis.edu[†]

b) Physics Department, Instituto Superior Politécnico "José Antonio Echeverría" (CUJAE), Havana, Cuba. llovera@electronica.cujae.edu.cu[‡]

c) Division of Mathematics and Science Holy Names University, Oakland, California, USA 94619. hucklebird@aol.com⁺

[†] corresponding author.

(Recibido 15/11/2010; Aceptado 28/9/2013)

The result of 2-dimensional Gaussian lattice fit to a speckle intensity pattern based on a linear model that includes nearest-neighbor interactions is presented. We also include a Monte Carlo simulation of the same spatial speckle pattern that takes the nearest-neighbor interactions into account. These nearest-neighbor interactions lead to a spatial variance structure on the lattice. The resulting spatial pattern fluctuates in value from point to point in a manner characteristic of a stationary stochastic process. The value at a lattice point in the simulation is interpreted as an intensity level and the difference in values in neighboring cells produces a fluctuating intensity pattern on the lattice. Changing the size of the mesh changes the relative size of the speckles. Increasing the mesh size tends to average out the intensity in the direction of the mean of the stationary process.

Se presenta el resultado del ajuste de una red gaussiana bidimensional a un patrón de intensidades de speckle sobre la base de un modelo lineal de interacción de entorno cercano. Se incluye una simulación de Monte Carlo del mismo patrón moteado que tomando en cuenta la interacción de corto alcance conduce a una estructura de varianza espacial de la red. El patrón de intensidad espacial resultante fluctúa en valores punto a punto de la manera característica de un proceso estocástico estacionario. El valor de cada punto de la red es interpretado como un nivel de intensidad. Las diferencias en los valores en las celdas colindantes producen un patrón de intensidad fluctuante sobre la red. Cambiando el tamaño de la malla cambian los tamaños relativos de las motitas. El incremento en el tamaño de la malla tiende a promediar la intensidad hacia la media del proceso estacionario.

PACS: Speckle pattern (42.30.Ms), Spatial Modeling, Brownian motion (05.40.Jc), Stochastic process (02.50.Ey), Monte Carlo methods (02.70.Uu).

I. BROWNIAN MOTION MODELS OF SPATIAL SPECKLE PATTERNS IN TIME.

It is known speckle patterns are fine-granular pattern of fluctuation of intensity reflected in a surface resulting of the superposition of coherent light like a laser (see Ref. [1]). Fig. 1 shows an example of speckle pattern obtained illuminating a surface of a volatile liquid deposited in a solid plate. The fluctuations of the spatial pattern are related to inhomogeneity in the scattering centers within the material. The spatial intensity distribution of the speckle pattern itself at any moment in time can be characterized by the methods of spatial modeling with point-to-point correlations. Such spatial modeling is the main objective of this paper.

The idea of characterizing the time dependence of speckle patterns by the method of Brownian motion theory has been proposed several years ago in Refs. [2] and [3]. Péron *et al.* make use of the fact that the speckle pattern contains information about the scattering/diffusion medium because the statistical properties of the speckles are related to the optical properties of the medium. Péron *et al.* employ the fractal method to approximate the diffusion process.

A stochastic process $\{X_t, t \geq 0\}$ is called a Brownian motion

process if:

- (i) $\{X_t, t \geq 0\}$ has stationary independent increments
- (ii) For every $t > 0$, X_t is normally distributed
- (iii) For all t , $E[X_t] = 0$
- (iv) $X_0 = 0$

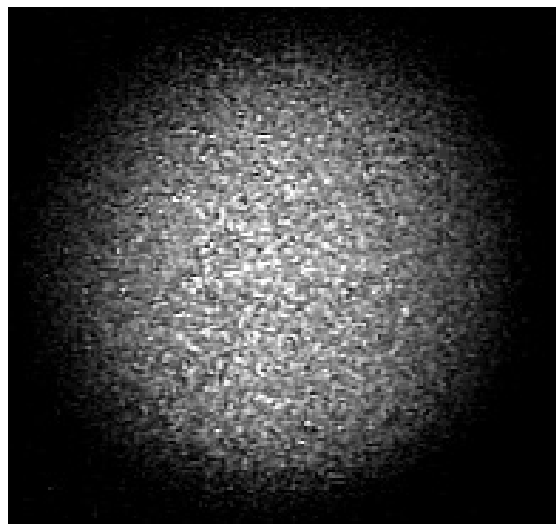


Fig. 1. Speckle pattern obtained illuminating with a laser beam a surface of a volatile liquid deposited in a solid plate.

In the model of Péron *et al.* the effects of autocorrelation lead to diffusion and are introduced using the fractional Brownian motion model

$$E[(X_{t_2} - X_{t_1})^2] \propto |t_2 - t_1|^{2H},$$

where H is the Hurst exponent characterizing the autocorrelation in time. For $0 < H < 0.5$ the correlations are negative, for $H = 0.5$ there is no correlation, and for $0.5 < H < 1$ the correlations are positive.

Diffusion over time is characterized by the following diffusion function

$$D_F(\Delta t) = E[(X_{(t+\Delta t)} - X_t)^2].$$

Ref. [3] uses Monte Carlo simulations of the scattering and interfering photon packets to characterize speckle patterns. The results are summarized in terms of the speckle contrast given by

$$K^2(T) = \frac{\langle I^2 \rangle}{I^2} - 1 = \frac{2}{T} \int_0^T \beta |g_1(\tau)|^2 \left(1 - \frac{\tau}{T}\right) dt,$$

where T is the integration time and β is the coherence factor. The light field is represented with a dynamic part and a static part and the function $g_1(\tau)$ is then split into two terms, which characterize these partial contributions. The function $g_1(\tau)$ is well represented by the stretched-exponential form derived, in the case of colloidal suspensions, from diffusing-wave spectroscopy (DWS) as

$$g_1(\tau) = \text{Exp}(-\gamma \sqrt{6\tau / \tau_0}),$$

where γ is a constant near 2 and τ_0 is the relaxation time characteristic of Brownian motion in the suspension.

Péron *et al.* parameterize the speckle pattern in terms of the rows and columns of a matrix laid out in a linear array. They then substitute the spatial intensity pattern for the temporal pattern by examining this linear array. They interpret the parameters in the diffusion function in terms of the spatial correlations via the Fokker-Planck parameterization:

$$D_F(\Delta X) = G_X [1 - \text{Exp}(-\lambda_X |\Delta X|^{2\nu})],$$

whererepresenting a spatial analog of the Hurst parameter.

II. SPATIAL SPECKLE CHARACTERIZATION.

We apply a similar analysis to the speckle data to describe a statistical method that incorporates nearest neighbor effects in the spatial pattern. Ref. [18] points out that it is not sufficient to assume that each sample point in a speckle is independent of its neighbors in SAR Speckle Simulation (see Ref. [18]).

Fig. 2 illustrates the cell-to-cell variation in the speckle intensity pattern. The spatial correlations are visible to the eye. It is the objective of this paper to develop a method of incorporating the cell-to-cell correlations of the intensity pattern in a 2-dimensional Gaussian lattice model.

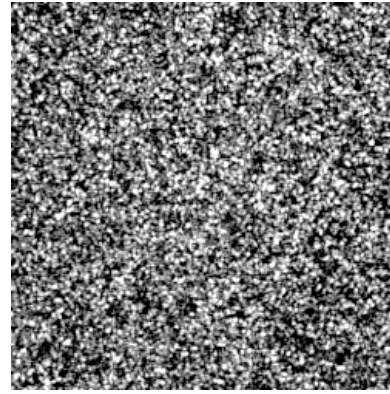


Fig. 2. High contrast speckle intensity pattern.

The intensity pattern corresponding to the data of Fig. 2 is plotted in Fig. 3 (in arbitrary units). The distribution is well fit to the Rician shape with parameters $I_0 = 32.397$ and $r = I_0 / I_{ave} = 1.867$ (see Eq. (13) in Ref. [19])

$$P(I) = \frac{1}{I_{ave}} \text{Exp} \left\{ - \left(\frac{I}{I_{ave}} + r \right) \right\} I_0 \left(2 \sqrt{\frac{I}{I_{ave}}} r \right),$$

where the second function in the above expression is the modified Bessel function I_0 .

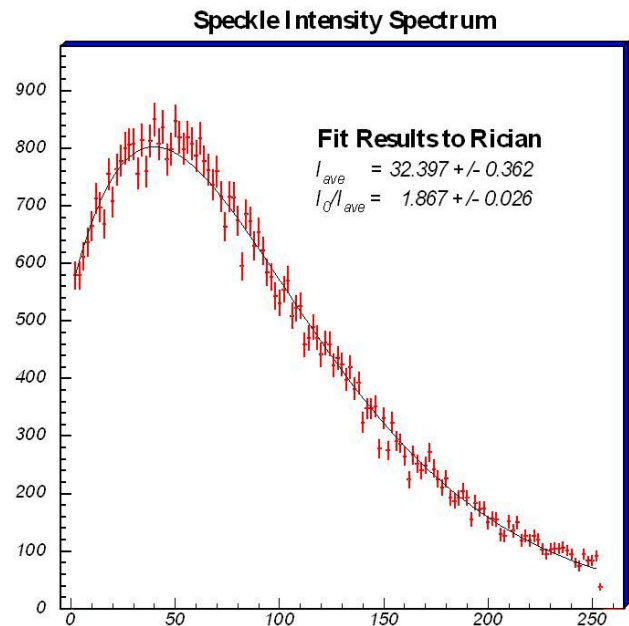


Fig.3. Speckle intensity pattern obtained from the data shown in Fig. 2 with fit to a Rician distribution superimposed.

Fig. 4 shows the spatial analog of the temporal Brownian motion analysis (based on the Fokker-Planck parameterization) and indicates that there is a positive spatial correlation when the cells of the intensity pattern are laid out linearly row-by-row (spatial Hurst parameter is close to 1). We therefore expect that nearest neighbor effects cannot be ignored. As can be seen in Fig. 5, there is also a visible auto-correlation in the nearest cells in the intensity pattern.

We now turn to a spatial analysis of the speckle based on a full lattice model including nearest neighbor lattice effects in order to determine correlation parameters associated with the underlying surface creating the speckle pattern.

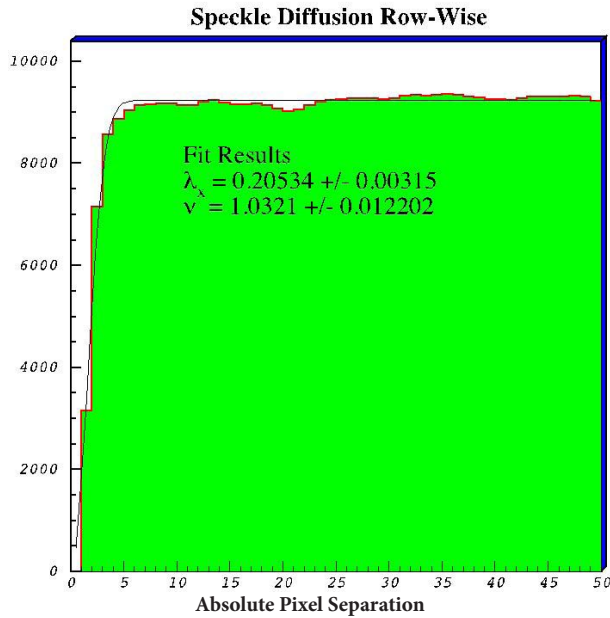


Fig.4. Spatial analog of spatial variance: $D_f(\Delta X)$ versus $\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\mathbf{u} + \boldsymbol{\varepsilon}_r$, (vertical scale is arbitrary).

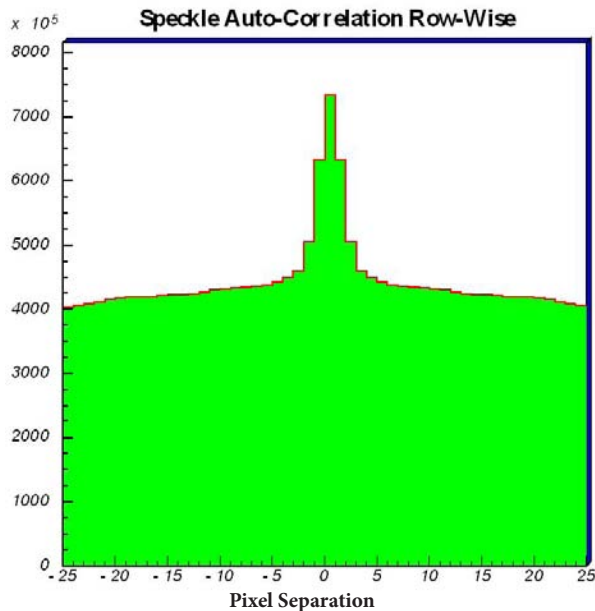


Fig.5. Row-wise spatial auto-correlation as a function of Pixel Separation (vertical scale is arbitrary).

3. MIXED LINEAR MODELS AND LATTICES.

In the following, we denote the transpose of a matrix \mathbf{R} by \mathbf{R}' . We also denote column vector in component form by square brackets, $\mathbf{v} = [a, b, c, \dots]$, and the corresponding row vectors with parentheses, $\mathbf{v}' = (a, b, c, \dots)$.

A spatial variable on a rectangular lattice is represented by u_{ij} which gives the value of the variable \mathbf{u} at the i -th row and j -th column. The effects of neighbors on the value for \mathbf{u} at i, j can be summarized in the following form.

$$u_{i,j} = \sum_{r,s \in \Omega} (\alpha_{r,s} u_{i-r, j-s} + \sigma \varepsilon_{ij}), \quad (1)$$

where the ε_{ij} are independent $N(0,1)$ normal deviates and Ω is a finite index set for r and s which limits the extent of the

influences from distant parts of the lattice. Eq. (1) can be recast into matrix form

$$\mathbf{u} = \Delta \mathbf{u} + \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (2)$$

where $E[\boldsymbol{\varepsilon}] = 0$ and $\text{var}[\boldsymbol{\varepsilon}] = \sigma^2 \mathbf{I}$. The above is used as a model for the surface that produces the speckle pattern and correlations are specific to that surface.

The form of Eq. (2) implies that the variance of \mathbf{u} is given by

$$\text{var}[\mathbf{u}] = \sigma^2 (\mathbf{I} - \Delta)^{-1} [(\mathbf{I} - \Delta)^{-1}]'$$

or that the inverse matrix is

$$\mathbf{G}^{-1} = \sigma^2 (\mathbf{I} - \Delta) (\mathbf{I} - \Delta)'. \quad (3)$$

Linear models, including mixed linear models, have found widespread use in statistical investigations. The linear model, though additive, is frequently flexible enough for real situations as an approximation around the mean. The mixed linear model is represented by:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\mathbf{u} + \boldsymbol{\varepsilon}_r, \quad (4)$$

Where \mathbf{Y} is a vector of observations, $\boldsymbol{\beta}$ is a vector of fixed effects; \mathbf{u} is vector of random effects and $\boldsymbol{\varepsilon}_r$ is the observational residual error. The matrices \mathbf{X} and \mathbf{Z} are incidence matrices that relate the various effects to observations.

The first moments for the random effects (their expectations) are $E[\mathbf{u}] = 0$ and $E[\boldsymbol{\varepsilon}_r] = 0$, and the variance-covariance structure is given by $\text{var}[\mathbf{u}] = \mathbf{G}$, $\text{var}[\boldsymbol{\varepsilon}_r] = \mathbf{R}$ and $\text{cov}[\mathbf{u}, \boldsymbol{\varepsilon}_r] = 0$. The linear model can be introduced on a lattice in which case both Eq. (2) and Eq. (4) come into play simultaneously. In this case

$$\mathbf{G} = \sigma^2 (\mathbf{I} - \Delta)^{-1} [(\mathbf{I} - \Delta)^{-1}]'$$

$$\mathbf{R} = \sigma_1^2 \mathbf{I}.$$

Additional assumptions are needed to implement maximum likelihood or computer simulation, and generally \mathbf{Y} , \mathbf{u} , and $\boldsymbol{\varepsilon}_r$ are taken as multivariate normal. As indicated in Goldberger (Ref. [5]), the Best Linear Unbiased Prediction (BLUP) of \mathbf{u} is found by evaluating

$$\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{GZ}'\mathbf{V}^{-1}[\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}],$$

where

$$\mathbf{V} = \text{var}(\mathbf{y}) = \mathbf{ZGZ}' + \mathbf{R}, \quad (5)$$

and $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ where is the Best Linear Unbiased Estimate (BLUE) of the fixed effects obtained by the Generalized Least Squares (GSE) problem

$$(\mathbf{XV}^{-1}\mathbf{X})[\hat{\boldsymbol{\beta}}] = [\mathbf{XV}^{-1}\mathbf{Y}]. \quad (6)$$

These equations can be reformulated so that the solutions can be obtained directly from the mixed model equations (Ref. [6])

$$\begin{pmatrix} \mathbf{X}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X} & \mathbf{X}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} \\ \mathbf{Z}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X} & \mathbf{Z}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{\beta}} \\ \hat{\mathbf{u}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Y} \\ \mathbf{Z}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Y} \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Associated with the mixed model equations is the Mixed Model Matrix

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X} & \mathbf{X}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} & \mathbf{X}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Y} \\ \mathbf{Z}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X} & \mathbf{Z}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} + \mathbf{G}^{-1} & \mathbf{Z}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Y} \\ \mathbf{Y}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{X} & \mathbf{Y}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z} & \mathbf{Y}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Y} \end{pmatrix}. \quad (8)$$

The log-likelihood for the Multivariate Normal (MN) applied to the lattice model is given by (see Ref. [15])

$$\ln(\text{MN}) = \text{const} - \frac{1}{2} \ln |\mathbf{V}| - \frac{1}{2} (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}). \quad (9)$$

The maximum likelihood estimates of $\boldsymbol{\beta}$ and the dispersion parameters (\mathbf{R} and \mathbf{G}) are found by maximizing the log-likelihood. Estimates of the dispersion parameters can be badly biased by small-sample errors induced by the estimation of. This is a serious problem when the dimension of $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ is large relative to the information available to estimate $\boldsymbol{\beta}$.

To overcome this problem, Patterson and Thompson (Ref. [7]) introduced Restricted Maximum Likelihood (ReML), where the dispersion parameters are found by maximizing

$$\ln(\text{ReMN}) = \text{const} - \frac{1}{2} \ln |\mathbf{V}| - \frac{1}{2} \ln |\mathbf{X}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}| - \frac{1}{2} (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}) \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}). \quad (10)$$

Where $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ is the solution obtained by GSE, Eq. (6). ReML has the advantage of eliminating the $\boldsymbol{\beta}$ parameters from the likelihood. This is especially useful in cases where one wants to concentrate on minimizing the deviations from a common mean, without explicitly finding that common mean. Ref. [8] states, "In contrast to conventional maximum likelihood estimation, ReML can produce unbiased estimates of variance and covariance parameters." Harville (Ref. [9]) derived the likelihood in Eq. (10) to treat the "error contrasts" which are found by taking a complete set of linear combinations of the observations which are sufficient to remove the effect of $\boldsymbol{\beta}$ while leaving the maximal amount of information for the purpose of ReML. An early review of ReML can be found in Ref. [10]. More recent reviews can be found in Ref. [11] and [12].

The above ReML likelihood can be put into an alternative form

$$\ln(\text{ReMN}) = \text{const} - \frac{1}{2} \ln |\mathbf{R}| - \frac{1}{2} \ln |\mathbf{G}| - \frac{1}{2} |\mathbf{C}| - \frac{1}{2} \frac{|\mathbf{M}|}{|\mathbf{C}|},$$

where \mathbf{C} is the coefficient matrix in Eq. (7), and \mathbf{M} is given by Eq. (8).

In dealing with lattice models, it is often the case that \mathbf{G} is a dense matrix, but \mathbf{G}^{-1} is sparse. Therefore it is more expedient to work with Eq. (3) in terms of \mathbf{G}^{-1} , than with \mathbf{G} directly. The term " $\frac{1}{2} \ln |\mathbf{R}|$ " is available by analytical methods because of the simple structure assumed for \mathbf{R} ($\mathbf{R} = \sigma^2 \mathbf{I}$ in most cases). The " $\frac{1}{2} \ln |\mathbf{G}|$ " term can be obtained by performing a Cholesky decomposition on \mathbf{G}^{-1} followed by using the diagonal elements from the Cholesky decomposition to compute the determinant $|\mathbf{G}^{-1}|$ and subsequently using the relationship that $\mathbf{G} = 1/|\mathbf{G}^{-1}|$. Ref. [17] has shown that by performing Cholesky

decomposition on \mathbf{M} above, then the expression

$$-\frac{1}{2} |\mathbf{C}| - \frac{1}{2} \frac{|\mathbf{M}|}{|\mathbf{C}|}$$

can also be obtained.

Numerical methods exist for calculating the first and second derivatives of all these functions. The Hessian can be constructed and an iterative procedure involving the Newton-Raphson method can be used to maximize the likelihood.

It is well known that the Cholesky decomposition runs to completion with any matrix that is symmetric and non-negative definite. In the event of singular covariance structure, it is possible to generalize this method (Ref. [4]).

The likelihood function is derived from elements of the Cholesky decomposition, and so there is nothing else that is needed to perform ReML but to find the derivatives that permit optimization by the iterative Newton-Raphson technique applied to the derivatives of the ReML likelihood. These derivatives come automatically with the Cholesky decomposition (see Ref. [13], [14]) and so there is little beyond constructing the matrices \mathbf{M} and \mathbf{G}^{-1} and their Cholesky decompositions, that must be considered to describe ReML. The pseudo-code for the differentiation of the Cholesky algorithm and directions for how to use it are to be found in Ref. [17].

IV. RESULTS OF FIT AND SIMULATION WITH AUTOCORRELATIONS.

We used the above ReML method above to fit an empirical speckle pattern from data, for example, see Fig. 2. The ReML method was implemented on a lattice model using the following nearest-neighbor relationship in the intensity pattern, which is based on Eq. (4) for the data and Eq. (2) for the model

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}_{i,j} &= \mu + \mathbf{u}_{i,j} + \boldsymbol{\varepsilon}_{ri,j} \\ \mathbf{u}_{i,j} &= \rho[\mathbf{u}_{i+1,j} + \mathbf{u}_{i-1,j} + \mathbf{u}_{i,j-1}] + \boldsymbol{\varepsilon}_{i,j} \end{aligned} \quad (11)$$

The first line of Eq. (11) contains the model for the data which contains the mean μ (corresponding to $\mathbf{X} = 1$ in Eq. 4), the lattice contribution $\mathbf{u}_{i,j}$, the error on the residual components $\boldsymbol{\varepsilon}_{ri,j}$. The first term on the second line of the Right-Hand Side of Eq. (11) contains the structure of Δ , which can be substituted into Eq. (3) in order to construct \mathbf{G}^{-1} . This \mathbf{G}^{-1} together with \mathbf{R}^{-1} can be used to construct the Mixed Model Matrix in Eq. (8) and the ReML likelihood function. This ReML likelihood can subsequently processed through the Newton-Raphson numerical method to find the best fit.

The original speckle pattern in Fig. 1 was digitized into a 251 x 251 grid of cells. In order to simplify the application of the Gaussian spatial lattice model the original grid was compressed to a 63 x 63 grid pattern by coarsening the grid pattern a factor of 4 in both horizontal and vertical dimensions and combining

the intensity values. Then the total intensity in the course grid was obtained by averaging the contribution from the original 16 cells contained within it.

The Average Intensity pattern of the data is shown in Fig. 6 with a fit to a Rician distribution yielding the values $I_0 = 9.471$ and $I_0/I_{ave} = 7.738$.

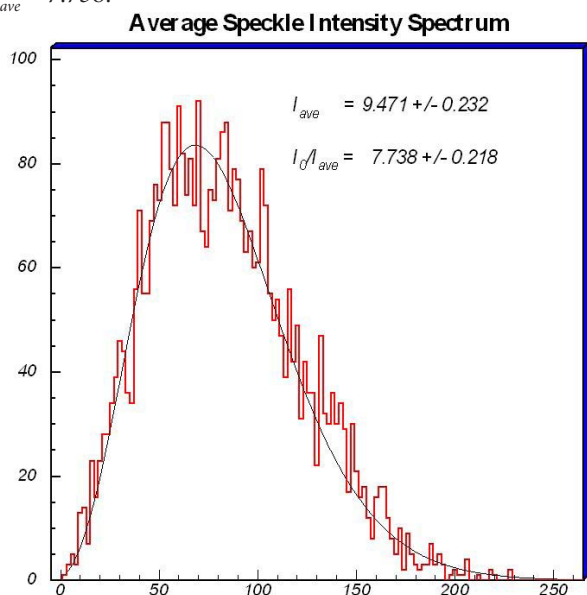


Fig. 6. Average Intensity Pattern of data in condensed grid.

The averaged data intensity distribution appears slightly more Gaussian in shape because of the addition of intensity contributions as expected from the Central Limit Theorem. The Mean of the averaged pattern is 82.5 and the width is 36.7 units.

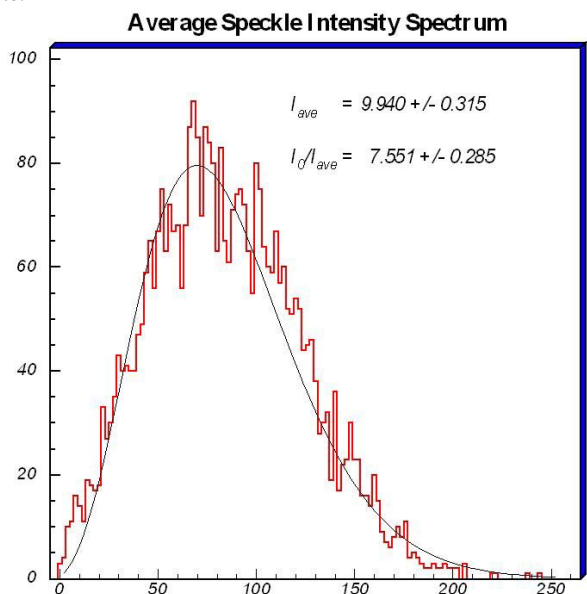


Fig. 7. Simulated Average Intensity Pattern of Gaussian Lattice Model. Superimposed curve is a fit to a Rician. The simulation produces an intensity pattern whose shape is more Gaussian in shape than the data.

Our Gaussian spatial lattice fit to the data yielded $\rho = 0.111$ and a sample variance ratio of 0.246. There is a positive correlation in the pixel intensity pattern from nearest neighbor cells in qualitative agreement with the positive spatial Hurst parameter

given in in Fig. 4.

In order to correctly simulate such a pattern this positive correlation must be taken into account (see Ref. [18]). The average intensity pattern for the simulated speckle pattern using the Gaussian spatial lattice is shown in Fig 7.

The simulated average intensity appears more Gaussian in shape with mean = 82.7 and width = 39.7 units, in agreement with the original data. Also show in Fig. 7 is a fit to a Rician with parameters similar to the data, although the fit is not as good as compared with Fig. 6, the fitted parameters are similar.

Fig. 8 compares the autocorrelation of the averaged intensity pattern of the data with that of the simulated data.

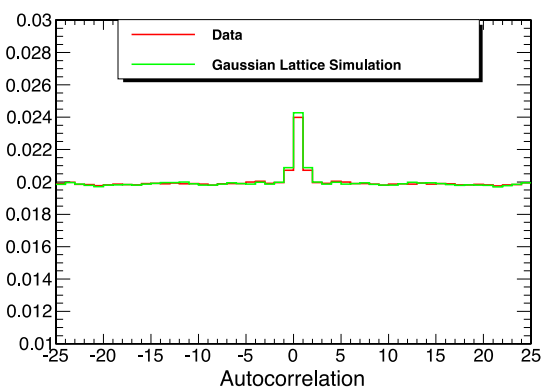


Fig. 8. Autocorrelation for data intensity pattern compared with the simulated Gaussian Lattice. Vertical scale is arbitrary units but has been suppressed at 0.01 to show detail.

The data is shown in red and the peak of the autocorrelation at 0 is in agreement with the shape of the simulation shown in green.

With the fit done we were also able to use Monte Carlo techniques to simulate similar patterns including the correlated spatial structure as can be seen in Fig. 9 (the vertical scale is arbitrary based on the largest intensity).

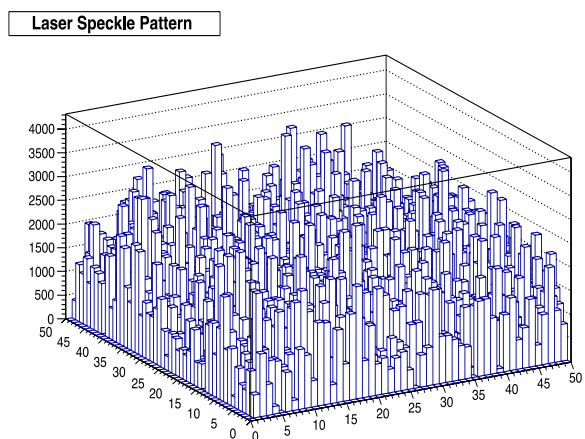


Fig. 9. Simulated speckle pattern in the intensity based on the Gaussian lattice model.

The technique for simulation was based on generating $N(0,1)$ Gaussian deviates, then scaling them into the $\epsilon_{i,j}$ of Eq. (11), and transforming those into simulations of $u_{i,j}$ of Eq. (11) utilizing

the sparse Cholesky decomposition of \mathbf{G}^{-1} . The estimate of μ was found by solving the linear system of Eq. (7) using the sparse Cholesky decomposition of \mathbf{C} . $\varepsilon_{r_{ij}}$ was simulated from $N(0,1)$ Gaussian deviates and then scaled.

The nearest neighbor correlation, ρ , is characteristic of the substrate producing the speckle pattern and is also a function of the grid size used in the analysis of the gaussian lattice model. When the simulated speckle pattern was itself run through a subsequent fit to a gaussian lattice model, the value of $\rho = 0,119$ and a sample variance ratio of 0.177 was obtained. The ρ parameter is very stable and the variation in the parameters is a measure of the accuracy of the fit.

The Gaussian lattice model can be expanded to include vertical and horizontal systematic effects in the illuminated substrate and may be useful in characterizing classes of substrates.

V. CONCLUSION

The method described in this the paper provides a way to analyze an actual speckle intensity pattern using a 2-dimensional spatial pattern on a lattice taking into account the nearest neighbor effects. The information can be summarized using the ReML method to estimate the parameters in the statistical model. The parameters characterize the statistical properties of the spatial speckle pattern, and estimating them permits statistical inferences having to do with variance and spatial correlations which are necessary to implement an accurate simulation (e.g., for SAR speckle simulation see Ref. 18). Completely new speckle patterns can be simulated from the spatial model that sets the parameters equal to the estimated parameters found from one data set.

[1] J. W. Goodman, *Speckle phenomena in optics. Theory and*

applications, (Roberts and Company Publishers, Englewood, Colorado USA 2007), pp. 1-2.

[2] Marie-Cécile Péron, Steve Guyot, Eric Deléchelle, *Phys. Rev. E* **70**, 046618 (2004).

[3] P. Zakharov, A Volker, A Buck, B Weber, F Scheffold, *Optics Letters* **31**, 3465 (2006).

[4] John R. Smith, in *FIMAT '09*, (Holguin, 2009).

[5] A. S. Goldberger, *Journal of the American Statistical Association* **70**, 369 (1962).

[6] C. R. Henderson, O. Kempthorne, S. R. Searle and C. N. Von Krosigk, *Biometrics* **15**, 192 (1959).

[7] H. D. Patterson and R. Thompson, *Biometrika* **58**, 545 (1971).

[8] http://en.wikipedia.org/wiki/Restricted_maximum_likelihood.

[9] David A Harville, *Biometrika* **61**, 383 (1974).

[10] David A. Harville, *Journal of the American Statistical Association* **72**, 320 (1977).

[11] Terry P. Speed, *ReML: A Brief Review*, Statistics Research Report No. SRR 004-95 (1995).

[12] Terry P. Speed, *Encyclopedia of Statistical Science*, vol 2 (Wiley, New York, 1997) pp. 472-481

[13] Stephen P. Smith, *A Tutorial on Simplicity and Computational Differentiation for Statisticians*. U. C. Davis Physics Dept. Memo, (2000).

[14] Stephen P. Smith, *Computational and Graphical Statistics* **10**, 350 (2001).

[15] Stephen P. Smith, *Computational Statistics & Data Analysis* **26**, 1 (1997).

[16] H. U. Graser, S. P. Smith, B. Tier, *Journal of Animal Science* **64**, 1362 (1987).

[17] Stephen P. Smith, *Journal of Computational and Graphical Statistics* **4**, 134 (1995).

[18] R. Keith Raney and Gerret J. Wessels, *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* **26**, 666 (1988).

[19] Vidal. F. Canales and Manuel P. Cagigal, *Applied Optics*, **38**, 766 (1999)

ESTUDIO TEÓRICO DEL MECANISMO ELEY-RIDEAL EN LA RECOMBINACIÓN DE NITRÓGENO SOBRE TUNGSTENO(110)

THEORETICAL STUDY OF ELEY-RIDEAL MECHANISM ON NITROGEN RECOMBINATION OVER TUNGSTEN(110)

E. QUINTAS-SÁNCHEZ^{a,b,c,†}, P. LARRÉGARAY^{b,c}, C. CRESPOS^{b,c}, A. PÉREZ-MELLOR^a

a) InSTEC, Ave. Salvador Allende esq. Luaces, 10600 La Habana, Cuba. quintas@instec.cu[†]

b) Univ. Bordeaux, ISM, UMR5255, F-33400 Talence, France.

c) CNRS, ISM, UMR5255, F-33400 Talence, France.

[†] autor para la correspondencia.

(Recibido 21/3/2013; Aceptado 30/9/2013)

Empleando el Método de Trayectorias Cuasiclásicas, estudiamos la recombinación de moléculas de nitrógeno en una superficie de W(110). La eficiencia de la reacción de recombinación Eley-Rideal (ER) es comparada con la reportada en la referencia [Quintas *et al.* Rev. Cub. Fis. **27**, 244 (2010)], donde dicha reacción es analizada sobre una superficie de W(100). Como ha sido observado en otros sistemas, la reactividad ER aumenta a medida que la interacción entre el átomo inicialmente adsorbido y el substrato disminuye, siendo sobre la superficie de W(110) muy superior a la reportada sobre W(100), especialmente a bajas energías de colisión.

Quasiclassical trajectories simulations are performed to study the recombination of Nitrogen molecules over W(110) surface. The efficiency of Eley-Rideal (ER) recombination reaction is compared with that reported on reference [Quintas *et al.* Rev. Cub. Fis. **27**, 244 (2010)], where the ER reaction is analyzed over W(100) surface. As it has been already observed in other systems, ER reactivity increases as the interaction among the initially adsorbed atom and the substrate decreases. Over W(110) surface ER recombination probability is greater than the observed over W(100), specially at low collision energies.

PACS: Gas-surface interface, 83.10 Rs. Eley-Rideal recombination, 68.49 Df.

I INTRODUCCIÓN

La combinación de detallados estudios teóricos basados en cálculos *ab initio* [1, 2, 3, 4] y el desarrollo de la técnica experimental de haces moleculares [5, 6, 7] ha permitido durante los últimos años realizar sustanciales avances en la comprensión de los procesos microscópicos que tienen lugar sobre la superficie de un metal.

Existen numerosos factores que influyen en la reactividad química de un gas sobre una superficie, incluyendo su temperatura y presión [8]. Pero existe una característica intrínseca de la superficie metálica que puede jugar un rol importante en su actividad química: la estructura de la superficie del cristal. Un ejemplo emblemático podemos encontrarlo en los estudios de la dispersión de moléculas de nitrógeno sobre superficies de hierro y tungsteno.

La probabilidad de disociación de moléculas de N₂ sobre superficies de hierro —sumamente importante al ser el paso que limita la velocidad de todo el proceso de síntesis del amoníaco [9, 10]— cambia en órdenes de magnitud dependiendo de la simetría de la superficie del metal, disminuyendo de (111) a (100), a (110) [11]. En el caso de la disociación de moléculas de N₂ sobre tungsteno a bajas

energías de colisión ($E < 100$ meV) también se observa una fuerte dependencia con la estructura de la superficie [12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20]: mientras la probabilidad de disociación es considerable en la superficie W(100) [15, 16], resulta dos órdenes de magnitud inferior en la superficie W(110) [14]. Esta sorprendente diferencia, explicada recientemente [17], se debe a la topología de la superficie de energía potencial (SEP) en el canal de entrada, a grandes distancias de la superficie ($Z \sim 3.25$ Å).

Como se evidencia en los estudios experimentales sobre la recombinación de moléculas de hidrógeno sobre la superficie de metales realizados por Küppers *et al.* [21, 22, 23, 24, 25, 26, 27] y Winkler *et al.* [28, 29, 30, 31] la recombinación molecular también puede depender fuertemente de la simetría de la superficie. Küppers, por ejemplo, estudia la reacción H(D)+D(H)/metal, y ajustando la velocidad de formación de H₂, HD y D₂ a modelos cinéticos, observa variaciones significativas en las diferentes caras del Pt(111,110,100) [22, 23, 24, 25] y del Cu(111,100) [26, 27].

Dos mecanismos límites son usualmente considerados al caracterizar la recombinación molecular de gases sobre

superficies. El mecanismo Langmuir-Hinshelwood (LH), el más abundante en la naturaleza [32, 33], asume que ambos reactivos están adsorbidos (en equilibrio térmico con la superficie) al recombinarse. Por el contrario, en el mecanismo Eley-Rideal (ER) partículas provenientes de la fase gas reaccionan directamente con partículas adsorbidas en el sustrato. Sin embargo, si los átomos incidentes no reaccionan inmediatamente al impactar la superficie, gran parte de su energía inicial puede ser transferida al movimiento en el plano paralelo al metal. Estos átomos reciben el nombre de *átomos calientes* (HA, por sus siglas en inglés) y pueden recorrer grandes distancias antes de reflejarse, reaccionar, o quedar finalmente adsorbidos sobre la superficie. La recombinación HA resulta un caso intermedio entre las reacciones ER y LH, y sus productos pueden ser difícilmente diferenciables de los de una recombinación ER.

En estudios anteriores hemos analizado en detalle la recombinación ER de moléculas de N_2 sobre W(100) [34, 35, 36, 37]. Para tener una visión más general de la recombinación ER de moléculas de N_2 sobre superficies de tungsteno, con este trabajo comenzamos el estudio (empleando una metodología similar) de la recombinación ER de N_2 sobre W(110), enfocándonos en la influencia de la simetría de la superficie del metal.

El artículo está organizado de la siguiente manera: en la Sección II presentamos detalles de la metodología utilizada, en la Sección III presentamos y discutimos los resultados obtenidos y finalmente en la Sección IV aparece un resumen de las conclusiones.

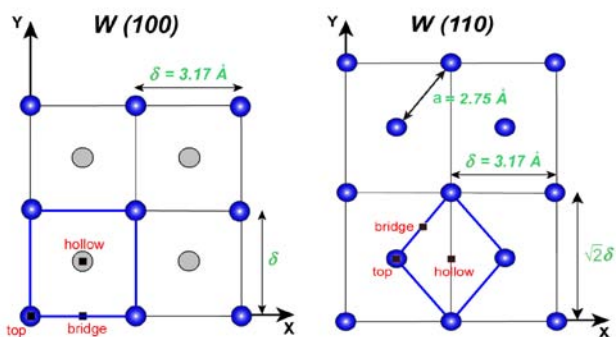


Figura 1: Simetría de la superficie de W(100) (izquierda) y W(110) (derecha). Los círculos azules (grises) representan átomos de tungsteno de la primera (segunda) capa. La celda unidad es resaltada en cada caso. Los sitios de alta simetría (*top*, *bridge*, *hollow*) y las distancias interatómicas características de cada superficie (δ , $\sqrt{2}\delta$, a) también aparecen representados.

II METODOLOGÍA

La metodología empleada ha sido ampliamente discutida en trabajos anteriores [34, 36]. La incidencia normal de los átomos de nitrógeno (proyectiles) sobre la celda unidad donde se encuentra previamente adsorbido otro átomo de nitrógeno (blanco) es modelada empleando el Método de Trayectorias Cuasiclásicas [38, 39, 40]. Considerando los átomos del metal

fijos en sus posiciones de equilibrio, la reacción tiene lugar en un espacio de configuración de seis dimensiones (tres grados de libertad por cada átomo de nitrógeno). La simulación de la dinámica teniendo en cuenta todas las dimensiones del problema ha demostrado ser de gran importancia en el estudio de los procesos elementales que tienen lugar en la interfaz gas superficie [41, 42].

Al estudiar la dinámica de recombinación de átomos pesados sobre superficies, el empleo de una metodología clásica resulta una alternativa plausible. Entre sus principales ventajas se encuentra su gran poder interpretativo y la relativa rapidez de las simulaciones. Las simulaciones cuánticas en sistemas como el nuestro, teniendo en cuenta todas las dimensiones, además de resultar extremadamente complicadas de implementar conllevan a tiempos de cálculo todavía prohibitivos. Estudios realizados en el sistema $H+H/Cu(111)$ —donde los efectos cuánticos resultan más importantes— muestran que el empleo de una metodología cuasiclásica logra reproducir de forma semi-cuantitativa los resultados cuánticos [43, 44, 45].

Dentro del marco de la aproximación Born–Oppenheimer, se presupone que todos los procesos tienen lugar en una misma SEP electrónicamente adiabática. Aunque al estudiar la dinámica de disociación de moléculas de N_2 en superficies de tungsteno se ha reportado que las interacciones electrón-hueco juegan un papel menor [41, 46, 47, 48], la importancia de dichas interacciones todavía es tema de discusión [49]. Teniendo en cuenta que las reacciones de recombinación directas ocurren muy rápidamente, las interacciones electrón-hueco no deben desempeñar un rol importante en nuestro estudio.

Las coordenadas de ambos átomos de nitrógeno están dadas respecto a un sistema de referencia cartesiano, que tiene su origen en uno de los átomos de tungsteno de la primera capa. El eje 'z' es perpendicular a la superficie y el plano 'xy', paralelo a la misma. La superficie se considera infinita en dos dimensiones (x,y). En la Figura 1 se muestra la simetría de las superficies de W(100) (izquierda) y W(110) (derecha). La SEP utilizada, una versión extendida del potencial periódico London-Eyring-Polanyi-Sato [50, 51], ha sido empleada con anterioridad para estudiar la dispersión de moléculas de N_2 sobre superficies de tungsteno, lográndose reproducir con precisión todos los detalles de la reflexión y la adsorción disociativa [19]. Los detalles de su construcción, se encuentran reportados en las referencias [18, 19, 20, 52]. Las características principales de la SEP —profundidad de los pozos de adsorción, distancia de equilibrio sobre la superficie, altura de la barrera de difusión— coinciden con las observadas en los cálculos *ab initio* [53, 54]. En la Tabla 1 se compara cuantitativamente la energía de adsorción (E_a), la distancia de equilibrio sobre la superficie (Z_a) y la barrera de difusión (E_d) en ambas superficies. Todas las unidades están dadas en Angströms y electronvolts. Nótese cómo en la superficie de W(110), al ser más compacta, la distancia de equilibrio del átomo adsorbido sobre el metal es casi el doble; mientras la energía de adsorción y la barrera de difusión disminuyen respecto a las observadas sobre W(100).

	N / W(100)	N / W(110)
Z_p (Å)	0.65	1.15
E_a (eV)	7.37	6.86
E_d (eV)	1.0	0.8

Todos los proyectiles comienzan a descender desde una altura igual a 8.0 \AA , distancia para la cual es despreciable la interacción con el metal. El átomo previamente adsorbido se coloca en su posición de equilibrio (sobre el *hollow*, ver Figura 1, a 1.15 \AA sobre la superficie), con la energía de punto cero: 75 meV , y velocidad inicial aleatoriamente distribuida (uniformemente) en dirección y sentido. Sin embargo, debido a la elevada energía de adsorción (ver Tabla 1), encontramos que las condiciones iniciales del átomo adsorbido no juegan un papel significativo en la dinámica de recombinación ER. Las coordenadas iniciales (x_i, y_i) del proyectil se escogen aleatoriamente en un sector de la celda unidad, aprovechando la simetría de la superficie. Las ecuaciones clásicas del movimiento son integradas empleando un algoritmo Verlet de velocidades [55, 56] con un paso de tiempo $\Delta t = 0.121 \text{ fs}$. Para cada energía de colisión (*i.e.* energía cinética inicial de los proyectiles), son propagadas 120000 trayectorias. El rango de energía estudiado es: $0.05\text{-}3.00 \text{ eV}$.

Solo aquellas trayectorias que tienen como resultado final la formación de una molécula de N_2 con un solo rebote del centro de masa del sistema son definidas como reacciones de recombinación ER.

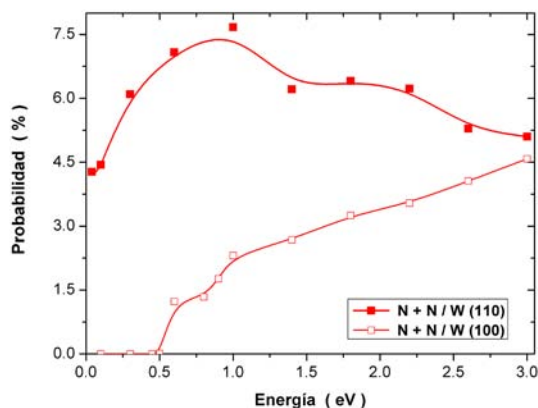


Figura 2: Probabilidad de recombinación ER en las superficies de W(100) y W(110) en función de la energía de colisión. La línea continua constituye solo una guía para la vista.

III RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En la Figura 2 se compara la probabilidad de recombinación ER en ambas superficies. De modo general la probabilidad de reacciones directas sobre la superficie de W(110) aumenta con respecto a la observada sobre W(100), especialmente a bajas energías de colisión; sin embargo, el comportamiento en ambas superficies se vuelve cada vez más similar a medida que aumenta la energía inicial de los átomos incidentes. A diferencia de lo que ocurre en la superficie de W(100), la probabilidad

de recombinación en la dirección cristalográfica (110) no tiene un comportamiento monótono creciente, sino que oscila entre 3.9 y 7.8 % en el rango de energías estudiado. Nótese además que desaparece el umbral (de 0.53 eV) observado en las recombinaciones directas de N_2 sobre W(100).

Para comprender las diferencias observadas en la reactividad, debemos comenzar analizando las características de los estados de adsorción atómica en ambas caras del metal (ver Tabla 1). A medida que la posición de equilibrio del átomo adsorbido se aleja de la superficie, la interacción N-N en el canal de entrada se vuelve más importante que la interacción N-superficie, facilitándose por tanto la formación de la molécula. Este efecto juega un papel importante solo a bajas energías de colisión, cuando los proyectiles se acercan lentamente a la zona de reacción. Por otro lado, mientras menor sea la energía de adsorción y la barrera de difusión, más fácilmente el átomo adsorbido puede romper el enlace con el sustrato y escapar al vacío tras formarse la molécula de N_2 . Un incremento en la reactividad ER a medida que la posición de equilibrio del átomo adsorbido se aleja de la superficie del metal y la fuerza de su enlace con el sustrato disminuye, ya ha sido observado con anterioridad en estudios teóricos de la recombinación de moléculas de H_2 sobre diversos sustratos modelos [57] y en la recombinación de H y Cl sobre una superficie de Au(111) [58, 59], donde se observa que para parámetros de impacto pequeños la reactividad ER aumenta considerablemente con la excitación vibracional inicial del átomo de Cl adsorbido: mientras la energía vibracional del átomo de Cl aumenta, es más probable encontrarlo más distante de la superficie y alejándose de esta. Un fenómeno similar es el responsable del incremento de la reactividad con la temperatura de la superficie reportado al estudiar experimentalmente la reacción de H con halógenos sobre la superficie de semiconductores [60] y el sistema H+Cl/Au(111) [61, 62].

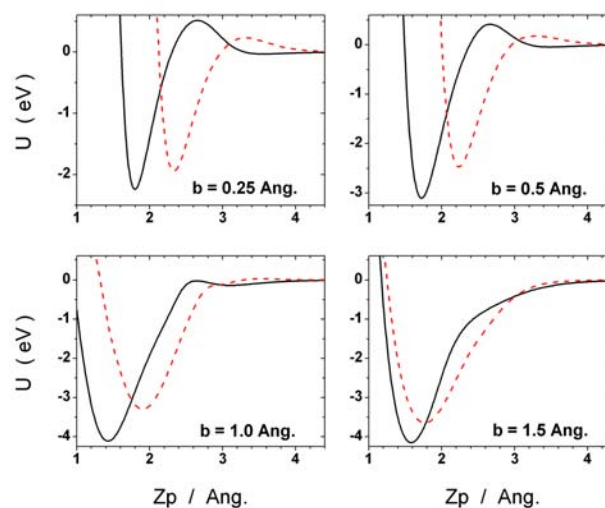


Figura 3: Cortes del potencial U vs Z_p para diferentes parámetros de impacto (b) sobre W(100) (líneas continuas) y W(110) (líneas discontinuas). En cada caso el átomo adsorbido se encuentra fijo en su posición de equilibrio. Ver el texto para más detalles.

En la Figura 3 se comparan cortes unidimensionales del potencial (U vs Z_p) en el canal de entrada ER para ambas

superficies. El átomo adsorbido se encuentra fijo en su posición de equilibrio, mientras la altura del proyectil (Z_p) varía para diferentes parámetros de impacto (b) a lo largo de la diagonal de la celda unidad. El cero del potencial representa la configuración donde el átomo incidente se encuentra infinitamente alejado de la superficie del metal. Nótese cómo sobre la superficie de W(110) —el átomo adsorbido se encuentra más alejado del metal en este caso— el pozo de potencial atractivo resulta menos profundo que en la superficie de W(100) y los átomos incidentes con parámetro de impacto pequeño comienzan a ser atraídos hacia el metal desde una mayor altura, haciendo más fácil para los proyectiles con bajas energías llegar hasta la zona de reacción. De este modo, átomos incidentes que son desviados fuera de la celda ocupada sin reaccionar en la superficie de W(100) [36], pueden acercarse al átomo adsorbido y reaccionar sobre la superficie de W(110). Nótese además cómo en la superficie de W(110) disminuye la altura de la estructura repulsiva del potencial observada en el canal de entrada ER, lo cual permite a los proyectiles acercarse más fácilmente a la zona de reacción. Ambos efectos contribuyen favorablemente al incremento de la reactividad, especialmente a energías de colisión pequeñas, y su importancia disminuye rápidamente al aumentar el parámetro de impacto.

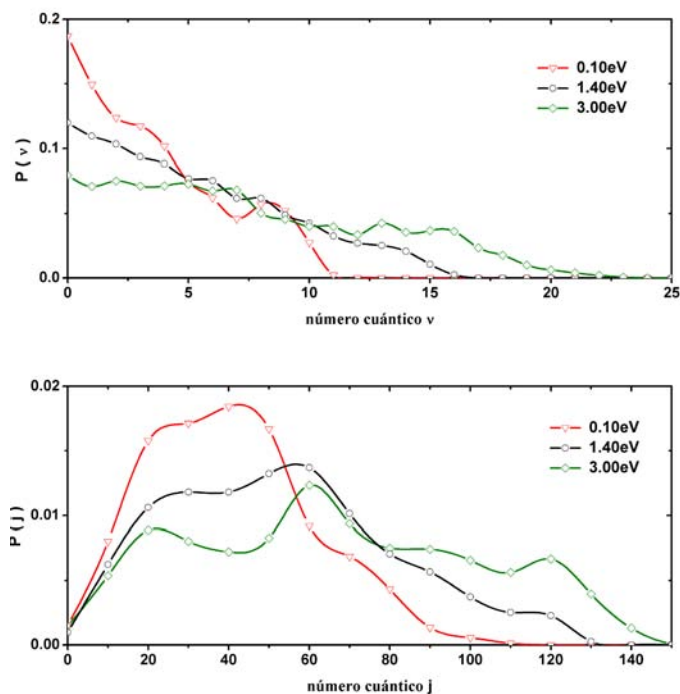


Figura 4: Distribuciones vibracionales (arriba) y rotacionales (abajo) de las moléculas de N_2 formadas para diferentes energías de colisión: $E_c = 0.1$ eV (triángulos), $E_c = 1.4$ eV (círculos) y $E_c = 3.0$ eV (rombos). Cada distribución se encuentra normalizada a 1. La línea continua constituye solo una guía para la vista.

Nuestros resultados sugieren que la simetría de la superficie de tungsteno influye notablemente en la dinámica de recombinación ER de moléculas de N_2 . Al ser más compacta, los átomos adsorbidos sobre la superficie de W(110) se encuentran más alejados del metal, su energía de enlace es menor y la atracción N-N en el canal de entrada es más importante que sobre la superficie de W(100), por lo que en

esta superficie los átomos incidentes son atraídos hacia el metal desde alturas superiores y disminuye el tamaño de la estructura repulsiva en el canal de entrada. Cada una de estas diferencias por sí sola favorece la reactividad —especialmente a bajas energías de colisión— y su combinación explica el notable incremento observado en la probabilidad de recombinación ER sobre la superficie de W(110) y por qué la reactividad en ambas superficies se vuelve cada vez más semejante a medida que aumenta la energía cinética inicial de los proyectiles.

En la naturaleza las reacciones ER son generalmente exotérmicas, por lo que las moléculas formadas a través de recombinaciones directas se caracterizan por estar altamente excitadas. En la Figura 4 se muestra la distribución de estados rotacionales y vibracionales de las moléculas de N_2 formadas sobre W(110) para energías de colisión (E_c) bajas (0.1 eV), medias (1.4 eV) y altas (3.0 eV). Cada distribución ha sido normalizada a la unidad. Al igual que en estudios experimentales [63, 64, 65] y cuasi-clásicos [66, 67] de la recombinación de HD sobre Cu(111), así como en los estudios previos de la recombinación ER de moléculas de N_2 sobre W(100) [37], en nuestra simulación también se observan productos con una gran excitación vibro-rotacional. Un comportamiento diferente fue observado al estudiar la recombinación de HD sobre Ni(100) [68, 69, 70], donde la excitación interna de los productos es en comparación menor.

La energía de enlace de la molécula de N_2 en el vacío es de 9.9 eV, si le restamos a este valor la energía de adsorción de un átomo de nitrógeno sobre la superficie (ver Tabla 1), obtenemos que la recombinación ER de moléculas de N_2 sobre W(110) será exotérmica por 3.04 eV. Como consecuencia —considerando inmóviles los átomos del metal— la máxima energía disponible para la molécula formada al ocurrir la recombinación (E_t^{max}) será 3.04 eV, más la energía de punto cero del átomo adsorbido (75 meV), más la energía cinética inicial del proyectil. En la Tabla 2 se muestra la distribución de E_t^{max} entre energía vibro-rotacional de la molécula formada (E_{vr}) y energía cinética de su centro de masa (E_{tras}) para diferentes energías de colisión. Al igual que observamos al estudiar las reacciones directas sobre W(110) [37], la fracción de energía disponible que se transforma en energía cinética de las moléculas formadas disminuye con el aumento de la energía de los átomos incidentes; sin embargo, a diferencia de lo que sucede sobre la superficie de W(100), en nuestro estudio la distribución energética entre E_{tras} y E_{vr} es mucho más balanceada, siendo solo para energías de colisión pequeñas que E_{tras} resulta como promedio ligeramente superior.

E_c	$\langle E_{vr} \rangle$	$\langle E_{tras} \rangle$
0.1	1.51	1.71
1.4	2.28	2.24
3.0	3.36	2.76

Nuevos estudios se encuentran en desarrollo para comprender

en detalle la dinámica de recombinación de las moléculas de nitrógeno sobre W(110) (especialmente a bajas energías de colisión), así como investigar la influencia en las reacciones ER del ángulo de incidencia de los proyectiles y del intercambio de energía con los átomos del sustrato (incluyendo el modelo de Osciladores Generalizados de Langevin [71, 3, 72, 73, 74, 75]).

IV. SUMARIO Y CONCLUSIONES

Empleando el Método de Trayectorias Cuasiclásicas, estudiamos la dinámica de las reacciones de recombinación molecular ER en un caso simplificado: la dispersión, con incidencia normal, de un átomo de nitrógeno sobre otro previamente adsorbido en la superficie de W(110). Comparamos la probabilidad de las reacciones directas con la reportada en la referencia [34], donde utilizando una metodología similar se analiza la recombinación de moléculas de N₂ sobre W(100). Empleamos como SEP una versión extendida de un potencial periódico LEPS que reproduce correctamente la topología de las interacciones y ha sido utilizada con anterioridad para estudiar la adsorción disociativa de moléculas de N₂ sobre W(110).

La simetría de la superficie de tungsteno juega un papel importante en la recombinación directa de moléculas de N₂. En el rango de energías estudiado (0.05-3.00 eV), la probabilidad de reacción ER sobre la superficie de W(110) es superior y su comportamiento con la energía de colisión resulta diferente al reportado para la superficie de W(100), desapareciendo el umbral observado al estudiar la recombinación ER en esta última.

Como ha sido observado en otros sistemas, la reactividad ER se incrementa a medida que la fuerza del enlace entre el átomo adsorbido y el sustrato disminuye: mientras menor es la energía de adsorción, más fácilmente el átomo adsorbido puede romper el enlace con el sustrato y formar la molécula de N₂. Por otro lado, mientras más alejado de la superficie se encuentre el átomo adsorbido, mayor importancia tendrá en el canal de entrada ER la interacción N-N, favoreciendo la formación de la molécula. Ambos efectos resultan mayores sobre la superficie de W(110) y su importancia disminuye a medida que la energía de colisión aumenta, explicando por qué la probabilidad de recombinación ER es mayor sobre la superficie de W(110), y por qué el comportamiento de la probabilidad de recombinación ER en ambas superficies se vuelve cada vez más similar a medida que aumenta la energía de colisión. Los productos exhiben una gran excitación vibro-rotacional y la máxima energía disponible al ocurrir la recombinación se distribuye de forma balanceada entre energía vibro-rotacional de las moléculas formadas y energía cinética de su centro de masa.

V. AGRADECIMIENTOS

Quisiéramos agradecer el soporte brindado por el Acuerdo Inter-Universitario para la Supervisión de un Doctorado en Cotutela entre el Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias

Aplicadas, Cuba, y la Universidad de Bordeaux I, Francia, así como a la embajada francesa en Cuba.

- [1] A. Gross, Surf Sci Rep **32**, 291 (1998).
- [2] D. A. McCormack et al., Phys Rev Lett **82**, 1410 (1999).
- [3] H. F. Busnengo, W. Dong and A. Salin, Phys Rev Lett **93**, 236103 (2004).
- [4] J. Behler et al., Phys Rev Lett **94**, 036104 (2005).
- [5] M. Duirr and U. Hofer, Phys Rev Lett **88**, 07610 (2002).
- [6] L. Vattuone, L. Savio and M. Rocca, Phys Rev Lett **90**, 228302 (2003).
- [7] J. Libuda and H. Freund, Surf Sci Rep **57**, 157 (2005).
- [8] D. W. Goodman, J Phys Chem **100**, 13090 (1996).
- [9] T. Rayment, R. Schlögl, J. M. Thomas and G. Ertl, Nature **315**, 311 (1985).
- [10] K. Honkala, A. Hellman, I. Remediakis, A. Logadottir, A. Carlsson, S. Dahl, C. Christensen and J. Norskov, Science **307**, 555 (2005).
- [11] F. Bozzo, G. Ertl and M. Weiss, J Catal **50**, 519 (1977).
- [12] P. W. Tamm and L. D. Smith, Surf Sci **26**, 286 (1971).
- [13] S. W. Singh-Boparail, M. Bowker and D. A. King, Surf Sci **53**, 55 (1975).
- [14] H. E. Pfnür, C. T. Rettner, J. Lee, R. J. Madix and D. J. Auerbach, J Chem Phys **85**, 7452 (1986).
- [15] C. T. Rettner, E. K. Schweizer, H. Stein and D. J. Auerbach, Phys Rev Lett **61**, 986 (1988).
- [16] C. T. Rettner, H. Stein and E. K. Schweizer, J Chem Phys **89**, 3337 (1988).
- [17] M. Alducin, R. Díez-Muiño, H. F. Busnengo and A. Salin, Phys Rev Lett **97**, 056102 (2006).
- [18] L. Martin-Gondre, C. Crespos, P. Larrégaray, J.-C. Rayez, B. van Ootegem and D. Conte, Chem Phys Lett **471**, 136 (2009).
- [19] L. Martin-Gondre, C. Crespos, P. Larrégaray, J.-C. Rayez, B. van Ootegem and D. Conte, J Chem Phys **132**, 204501 (2010).
- [20] L. Martin-Gondre, C. Crespos, P. Larrégaray, J.-C. Rayez, D. Conte and B. van Ootegem, Chem Phys **367**, 136 (2010).
- [21] T. Kammler, J. Lee and J. Küppers, J Chem Phys **106**, 7362 (1997).
- [22] T. Kammler, S. Wehner and J. Küppers, J Chem Phys **109**, 4071 (1998).
- [23] S. Wehner and J. Küppers, J Chem Phys **108**, 3353 (1998).
- [24] S. Wehner and J. Küppers, Surf Sci **411**, 46 (1998).
- [25] T. Zecho, B. Brandner and J. Küppers, Surf Sci Lett **418**, L26 (1998).
- [26] T. Kammler and J. Küppers, J Chem Phys **111**, 8115 (1999).
- [27] D. Kolovos-Vellianitis, T. Kammler and J. Küppers, Surf Sci **454-456**, 316 (2000).
- [28] G. E. Eilmsteiner, W. Walkner and A. Winkler, Surf Sci **352-354**, 263 (1996).
- [29] G. E. Eilmsteiner and A. Winkler, Surf Sci **366**, 1750 (1996).
- [30] J. Boh, G. E. Eilmsteiner, K. D. Rendulic and A. Winkler,

- Surf Sci **395**, 98 (1998).
- [31] H. Poelzl, G. Strohmmeier and A. Winkler, J Chem Phys **110**, 1154 (1999).
- [32] W. H. Weinberg, C. T. Rettner and M. N. R. Ashfold, eds., *Dynamics of Gas Surface Interactions*, (Royal Society of Chemistry, London, 1991), chapter 5, 171–219.
- [33] R. J. Baxter and P. Hu, J Chem Phys **116**, 4379 (2002).
- [34] E. Quintas-Sánchez, L. Martin-Gondre, P. Larrégaray, C. Crespos, J. Rubayo-Soneira and J.-C. Rayez, Rev Cub Fis **27**, 244 (2010).
- [35] L. Barrios-Herrera, E. Quintas-Sánchez, L. Martin-Gondre, P. Larrégaray, C. Crespos, J. Rubayo-Soneira and J.-C. Rayez, Rev Cub Fis **28**, 61 (2011).
- [36] E. Quintas-Sánchez, L. Martin-Gondre, P. Larrégaray, C. Crespos, J.-C. Rayez and J. Rubayo-Soneira, J Chem Phys **137**, 064709 (2012).
- [37] E. Quintas-Sánchez, C. Crespos, P. Larrégaray, J.-C. Rayez, L. Martin-Gondre and J. Rubayo-Soneira, J Chem Phys **138**, 024706 (2013).
- [38] R. Porter and L. M. Raff, *Dynamics of Molecular Collisions* (Plenum, New York, 1976).
- [39] D. G. Truhlar and J. T. Muckerman, *Atom-Molecule Collision Theory: A Guide for the Experimentalist* (Plenum, New York, 1979).
- [40] T. D. Sewell and D. L. Thompson, Int J Mod Phys **11** (1997).
- [41] G. J. Kroes, Science **321**, 794 (2008).
- [42] C. Díaz, J. K. Vincent, G. P. Krishnamohan, R. A. Olsen, G. J. Kroes, K. Honkala and J. K. Nørskov, Phys Rev Lett **96**, 096102 (2006).
- [43] B. Jackson and M. Persson, J Chem Phys **103**, 6257 (1995).
- [44] M. Persson and B. Jackson, J Chem Phys **102**, 1078 (1995).
- [45] M. Persson and B. Jackson, Chem Phys Lett **237**, 468 (1995).
- [46] I. Goikoetxea, J. I. Juaristi, M. Alducin and R. Diez, J Phys: Condens Matter **21**, 264007 (2009).
- [47] J. I. Juaristi, M. Alducin, R. Diez, H. F. Busnengo and A. Salin, Phys Rev Lett **100**, 116102 (2008).
- [48] J. I. Juaristi, M. Alducin, R. Diez-Muino, H. F. Busnengo and A. Salin, Phys Rev Lett **102**, 109602 (2009).
- [49] A. C. Luntz, I. Makkonen, M. Persson, S. Holloway, D. M. Bird and M. S. Miziałowski, Phys Rev Lett **102**, 109601 (2009).
- [50] J. H. McCreery and G. Wolken, J Chem Phys **63**, 2340 (1975).
- [51] J. H. McCreery and G. Wolken, J Chem Phys **67**, 2551 (1977).
- [52] L. Martin-Gondre, *Contribution théorique à l'étude de la réactivité élémentaire gaz-surface d'intérêt en rentrée atmosphérique*, Ph.D. thesis, (http://ori-oai.u-bordeaux1.fr/pdf/2009/MARTIN_LUDOVIC_GABRIEL_MICHELEL_2009.pdf) Université Bordeaux I, France (2009).
- [53] G. Volpilhac, H. F. Busnengo, W. Dong and A. Salin, Surf Sci **544**, 329 (2003).
- [54] G. Volpilhac and A. Salin, Surf Sci **556**, 129 (2004).
- [55] L. Verlet, Phys Rev **159**, 98 (1967).
- [56] L. Verlet, Phys Rev **165**, 201 (1968).
- [57] B. Jackson and D. Lemoine, J Chem Phys **114**, 474 (2001).
- [58] D. Lemoine, J. D. Quattrucci and B. Jackson, Phys Rev Lett **89**, 268302 (2002).
- [59] J. G. Quattrucci, B. Jackson and D. Lemoine, J Chem Phys **118**, 2357 (2003).
- [60] C. C. Cheng, S. R. Lucas, H. Gutleben, W. J. Choyke and J. T. Yates, J Am Chem Soc **114**, 1249 (1992).
- [61] C. T. Rettner, J Chem Phys **101**, 1529 (1994).
- [62] C. T. Rettner and D. J. Auerbach, Science **263**, 365 (1994).
- [63] C. T. Rettner, Phys Rev Lett **69**, 383 (1992).
- [64] C. T. Rettner, H. A. Michelsen and D. J. Auerbach, J Chem Phys **102**, 4625 (1995).
- [65] C. T. Rettner and D. J. Auerbach, Phys Rev Lett **74**, 4551 (1995).
- [66] D. V. Shalashilin, B. Jackson and M. Persson, Faraday Discuss **110**, 287 (1998).
- [67] D. V. Shalashilin, B. Jackson and M. Persson, J Chem Phys **110**, 11038 (1999).
- [68] R. Martinazzo, S. Assoni, G. Marinoni and G. F. Tantardini, J Chem Phys **120**, 8761 (2004).
- [69] Z. B. Guvenc, X. Sha and B. Jackson, J Chem Phys **115**, 9018 (2001).
- [70] Z. B. Guvenc, X. Sha and B. Jackson, J Phys Chem B **106**, 8342 (2002).
- [71] H. F. Busnengo, W. Dong, P. Sautet and A. Salin, Phys Rev Lett **87**, 127601 (2001).
- [72] H. F. Busnengo, M. A. Di Césare, W. Dong and A. Salin, Phys Rev B **72**, 125411 (2005).
- [73] M. Dohle, P. Saalfrank and T. Uzer, J Chem Phys **108**, 4226 (1998).
- [74] S. A. Adelman, J Chem Phys **71**, 4471 (1979).
- [75] J. C. Tully, J Chem Phys **73**, 1975 (1980).

BUTYRIC ACID INTERACTION WITH CARBON NANOTUBES: MODELING BY A SEMI-EMPIRICAL APPROACH

APROXIMACIÓN SEMI-EMPÍRICA A LA MODELACIÓN DE LA INTERACCIÓN ENTRE ÁCIDO BUTÍRICO Y NANOTUBOS DE CARBONO

M. J. AL-ANBER

Computational Physics Molecular Lab., Department of Physics, College of Science, Basrah University, Basrah, Iraq.
mohanned.mohammed@uobasrah.edu.iq

(Recibido 16/5/2013; Aceptado 7/10/2013)

The quantum interaction properties of the butyric acid radical on the side walls of the single walled carbon nanotubes (CNT) are modeled by PM3 calculations. It is found that the interaction potential of the butyric acid with the tubes forms stable complexes when it reacts with the carbon atom (C³-centered) and metastable conformations with the C¹ and C² atoms. We have studied the effect of the diameter-length characteristics of the CNT on the binding with a fatty acid. Our results suggest that the binding energy decreases as the diameter increases, and it initially increases as the length increases.

Se investigan, mediante cálculos PM3, las propiedades de interacción cuántica del radical de ácido butírico y las paredes laterales de nanotubos mono-pared. Se encuentra que el potencial de interacción del ácido butírico con los tubos forma complejos estables cuando reacciona con el átomo de carbono (C³-centrado), y configuraciones metaestables con los átomos C¹ y C². Hemos estudiado el efecto de las características diámetro-longitud del nanotubo de carbono en su enlace con un ácido graso. Nuestros resultados sugieren que la energía de enlace decrece al aumentar el diámetro, pero se incrementa al aumentar la longitud del nanotubo.

PACS: Carbon nanotubes structure of, 61.48.De. Binding energy solids, 71.15.Nc. Computational techniques electronic structure atoms and molecules, 31.15.-p.

INTRODUCTION

The characteristics and behavior of nano-materials are a new field of science, being limited to nano-scale dimensions (1–100 nm). Nano-structures have a quantum nature due to their atomic and molecular size. A question is how the experiments can approach to the atomic level to do nano-measurements? Carbon nanotubes (CNTs), which were discovered by Iijima [1], can be considered as sheets of graphite wrapped to a cylindrical form. CNT can be synthesized by the techniques of electric arc discharge, laser ablation, and catalytic decomposition of hydrocarbons [2–8]. Because the CNTs have special thermal, mechanical, and electrical properties and the ability to be applied at atomic levels, it makes them promising structures for working in wide fields of applications. Many of these applications are in biology and medicine. The ability of CNT to penetrate into cells offers the potential of using CNT for delivery of drug and antibiotic molecules without toxicity effects [9–20]. In spite of the wide applications of CNT, theoretical studies of the interaction mechanism between the CNTs and biomolecules are few [20,21]. Mavrandonakis *et al.* have studied the interaction of an amino acid with CNT [22], and then few studies followed [23,24]. Butyric acid is a fatty acid occurring in the form of esters in animal

fats. It is an important member of the fatty acid subgroup called short-chain fatty acids. Butyric acid is a medium-strong acid that reacts with bases and strong oxidants, and attacks many metals [25]. It enhances apoptosis of T-cells in the colonic tissue thereby eliminating the source of inflammation (IFN- γ production) [26]. This is known as the “butyrate paradox”. Butyrate inhibits colonic tumor cells, and promotes healthy colonic epithelial cells [27].

In this work, we examine the interaction of butyric acid radical on the sidewalls of single-walled CNT, which has a bond-alternation pattern defined as an armchair type [28]. Then we examine this interaction as a function of CNT diameter and length. Then, we investigate the effect of changing the position of the butyric acid-CNT bond on the interaction energy. Finally, to study the effect of rotating the butyric acid around of the butyric acid-CNT bond on the interaction energy and then the rotating of carboxyl group in butyric acid.

THEORETICAL APPROACH AND COMPUTATIONAL DETAILS

Theoretical calculations are used to bridge gaps in understanding the experimental results, so in many issues the results of the

experimental methods are unable to accurately describe small components of biochemical. While the molecular quantum mechanics methods can be used to investigate properties beyond the scope of current crystallographic methods, the theoretical methods can be used to further investigation and to predict the physical and chemical nature of hydrogen bonding interactions [29, 30]. To investigate the structural and electronic properties of CNTs decorated with the butyric acid radicals, we used semi-empirical method PM3. PM3 or Parameterized Model number 3, developed by James Stewart [31,32], is a re-parameterization of AM1 method, which is based on the neglect of differential diatomic overlap (NDDO) integral approximation. The PM3 method uses the same formalism and equations as the AM1 method. The differences are: (1) PM3 uses two Gaussian functions for the core repulsion function, instead of the variable number used by AM1 (which uses between one and four Gaussians per element); (2) the numerical values of the parameters are different. The other differences lie in the philosophy and methodology used during the parameterization: whereas AM1 takes some of the parameter values from spectroscopical measurements, PM3 treats them as optimizable values. The parameters for PM3 were derived by comparing a much larger number and wider variety of experimental versus computed molecular properties. Typically, non-bonded interactions are less repulsive in PM3 than in AM1. PM3 method is primarily used for organic molecules, but is also parameterized for many main group elements. Several modifications that have been made to the NDDO core-core interaction term and to the method of parameter optimization are described. These changes have resulted in a more complete parameter optimization, called PM6, which has, in turn, allowed 70 elements to be parameterized [33]. In an attempt to expand the range of applicability, a new method called PM7 has been developed. PM7 was parameterized using experimental and high-level *ab initio* reference data, augmented by a new type of reference data intended to better define the structure of parameter space [34]. The problem that arises is how we can perform the accurate calculations to a nano-sized system without ending in a prohibitive large computation. The dangling bonds at the ends of the tubes were saturated by hydrogen atoms. The resolution of PM3 and QSAR model (Quantitative structure–activity relationship models) as implemented in the HyperChem™ Release 7.52 for Windows Molecular Modelling System program package (<http://www.hyper.com/>) was employed for the geometry optimizations.

RESULTS AND DISCUSSION

To connect the butyric acid with CNT surface, so that one hydrogen atom must be omitted from the butyric acid. The butyric acid contain three carbon atoms, so there three probable positions (isomers). For our investigation it was important to find the most stable isomers of the butyric acid (fatty acid) radicals. These three isomers appear according to omitted hydrogen atom from the three carbon atoms in butyric acid respectively. Among the three possible isomers are the

ones from which one hydrogen atom is abstracted from the C-atom, see figure 1. The geometry optimized for these three isomers were calculated by PM3. Also the neutral butyric acid optimized before omit hydrogen atom. The relative energy $\Delta E = \Delta \epsilon^* - \Delta \epsilon$; $\Delta \epsilon = \epsilon^{\text{neutral}} - \epsilon^{\text{radical}}$; $\epsilon^{\text{neutral}}$ is the optimized energy for the butyric acid and $\epsilon^{\text{radical}}$ is the optimized energy for the radical of butyric acid after one hydrogen atom is abstracted from the C-atom and $\Delta \epsilon^*$ is the lowest $\Delta \epsilon$. According to the relative energy ΔE , it is found that the C²-centered radical is favored over the C¹ and C³-centered one by 6.81 and 1.27 kcal/mol, respectively, employing the PM3 method. These energy differences among the isomers of the butyric acid are not much comparable with the isomers of amino acid (glycine) [22,23].

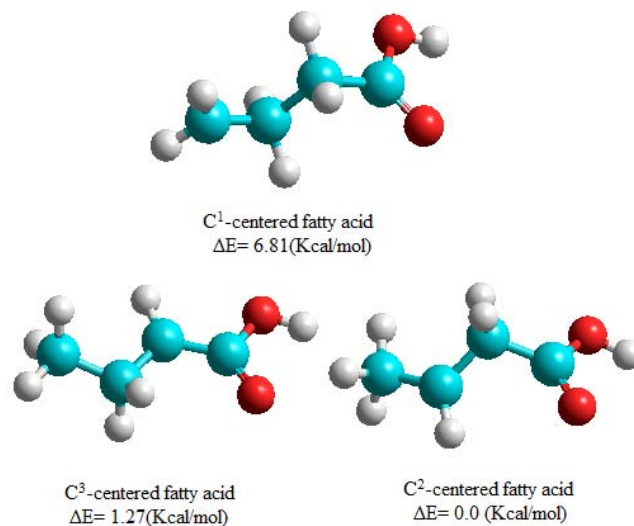


Figure 1. The geometry optimized of the three isomers of the butyric acid radicals and their relative stability ΔE .

Then, we calculated the interaction of the butyric acid radicals with the CNTs. For this purpose the armchair type of CNT which adopted with diameter and length equal to 5.78 Å and 9.925 Å respectively. Then we connected the three isomers on the surface of CNT. The geometry optimized for these three issues were calculated by PM3. The binding energy $BE = \epsilon^{\text{Butyric-CNT}} - (\epsilon^{\text{CNT}} + \epsilon^{\text{Butyric}})$; $\epsilon^{\text{Butyric-CNT}}$ is the optimized energy for the butyric acid with the CNT, ϵ^{CNT} is the optimized energy for the CNT alone and $\epsilon^{\text{Butyric}}$ is the optimized energy for the radical of butyric acid (C¹, C² and C³ respectively). The relative binding energy $\Delta BE = BE - BE^*$; BE^* is the binding energy for the highest one. The relative energy $\Delta E = \epsilon^* - \epsilon$; $\epsilon = \epsilon^{\text{Butyric-CNT}}$ and ϵ^* is the optimized energy for the lowest one. We find that upon reaction with the single tube wall, the butyric acid radical forms stable complexes when it reacts with the carbon atom (C³-centered) and metastable conformations with C¹ and C²-centered butyric acid, see figure 2, along with their relative binding energies BE and relative stabilities ΔE . Thus, we have had the interest to study the interaction of the C³-centered with CNTs only. If we compared the relative densities $\Delta \rho$, $\Delta \rho = \rho - \rho^*$; ρ^* is the density of the lowest butyric acid radical, among these three isomers, the C³-centered with CNT owned the highest one. So, it has ability to enter inside the cells lower than the two other isomers, because of the viscosity η increases, which is proportional to the density $\eta \sim \rho$.

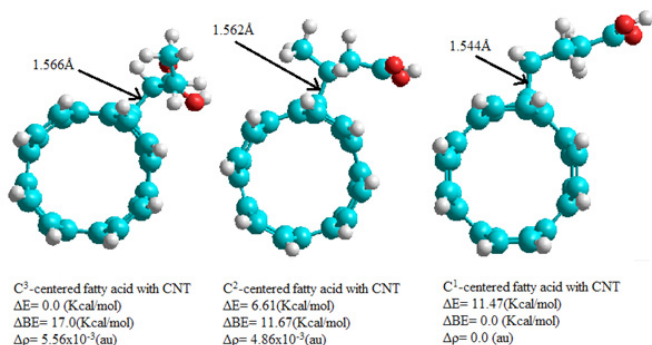


Figure 2. Geometry optimized structures of butyric acid with CNT.

The first important factor is examining the nature of the interaction of butyric acid (C^3 -centered) with CNT as a function of the diameter of the CNT, so the armchair type of CNT which adopted with length equal to 5.149 Å. Note that in each case, we put the $C_{\text{butyric acid}} - C_{\text{CNT}}$ bond on the middle of CNT surface. The geometry optimized for each change in the diameter of CNTs was calculated by PM3. The increasing effect in the CNT diameter on the binding energy between the C^3 -centered butyric acid radicals with CNT were shown in figure 3. Where any increase in the diameter of CNT will lead to rapid decrease in the binding energy between the C^3 -centered butyric acid radicals with CNT. The behavior of rapid decreasing was not expected comparable to the behavior of glycine with CNT [23]. The binding energy becomes semi-constant as the CNT diameter wide than 5 Å. This case may reflect the mechanism of lower binding between the butyric acid with CNT in future. Generally, the CNT that has diameter more than 3.5 Å was more sensitive to the amino acid, if we compare it to the fatty acid.

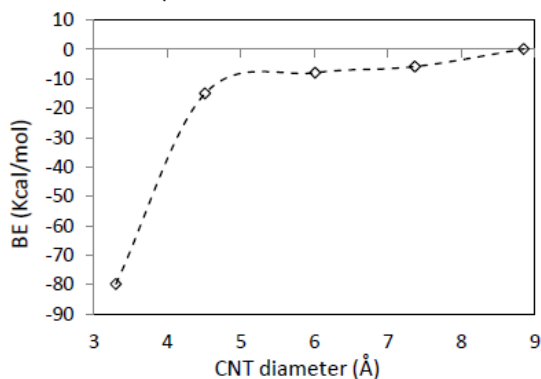


Figure 3. The binding energy between the C^3 -centered butyric acid with the C_{CNT} as a function of the CNT diameter.

In the C^3 -centered binding, a single covalent $C_{\text{butyric acid}} - C_{\text{CNT}}$ bond is formed with CNT. The $C_{\text{butyric acid}} - C_{\text{CNT}}$ bond becomes long as the diameter of CNT increase, see figure 4. Whereas the increases the CNT diameter will increase the covalent bond length and this may decrease the binding energy, see figure 3. Table 1 displays the results of QSAR model, where, as the CNT diameter increases, also there is an increase in the density ρ . The viscosity η will increase, so the ability of butyric acid with CNT to enter inside the cell may decrease. By this way, we can lower or higher the ability of entering the fatty acid-CNT into the cells.

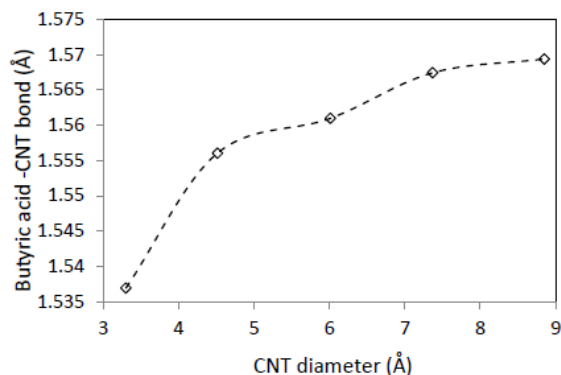


Figure 4. The length of the $C_{\text{butyric acid}} - C_{\text{CNT}}$ bond as a function of CNT diameter.

CNT diameter (Å)	$\Delta\rho$
3.302	0.000
4.516	0.049
6.0135	0.063
7.371	0.067
8.852	0.069

The second important factor is the interaction of butyric acid with different lengths from CNT, so the armchair type of CNT which adopted with diameter equal to 5.78 Å. Note that in each case, we put the $C_{\text{butyric acid}} - C_{\text{CNT}}$ bond on the middle of CNT surface. The geometry optimized for each change in the length of CNTs was calculated by PM3. The operation of increase the CNTs length during their synthesis is very important property. The binding energy of the C^3 -centered butyric acid radicals with CNT may depend on the length of CNT, see figure 5. As the length of CNTs increases, the binding energy between the C^3 -centered butyric acid radicals with CNTs also increases. Generally, butyric acid behavior with the CNTs length was same as to the behavior of glycine [23]. With few orders of length the change of binding energy lowers. If we compare between the effect of CNTs diameter and length on the binding energy, we may note that the binding between the butyric acid and CNT depending on the diameters of CNTs more than depend on their lengths. The $C_{\text{butyric acid}} - C_{\text{CNT}}$ bond length as a function of CNT length is shown in figure 6, where its length is lowering and then increases in its values as the CNT lengths increase. Table 2 displays how the increasing of CNT lengths will increase the relative density. The viscosity will increase with CNT lengths more than the CNT diameter increasing.

Where does the butyric acid prefer to link on the surface of CNT? There are many positions may be the butyric acid prefer to connect on the CNTs surface, see figure 7. The geometry optimized for each position on the surface of CNTs was calculated by PM3. The relative stability of the C^3 -centered butyric acid radicals with CNT will decrease as a function of the position of the $C_{\text{butyric acid}} - C_{\text{CNT}}$ bond on the cylindrical surface of the CNT, where this position change from the middle of the CNT surface forward one of their two ends. Figure 7 shows the positions 1,2 ...6 of butyric acid on

the CNT surface. The butyric acid radical with the single tube wall, become more stable, when the butyric reacts with the CNT at position 3, which at the half distance between the middle position and the end of the CNT. Generally, the butyric acid prefers to link at position 3 on the CNT surface.

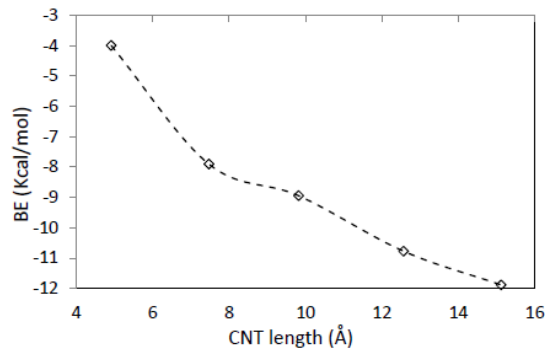


Figure 5. The binding energy of the C³-centered butyric acid radicals with the CNTs as a function of CNT length.

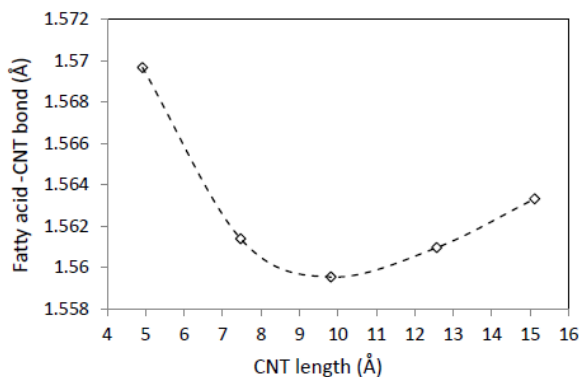


Figure 6. The length of the C_{butryric acid}-C_{CNT} bond as a function of CNT length.

CNT length (Å)	$\Delta\rho$
4.92	0.000
7.47	0.045
9.83	0.080
12.57	0.077
15.12	0.124

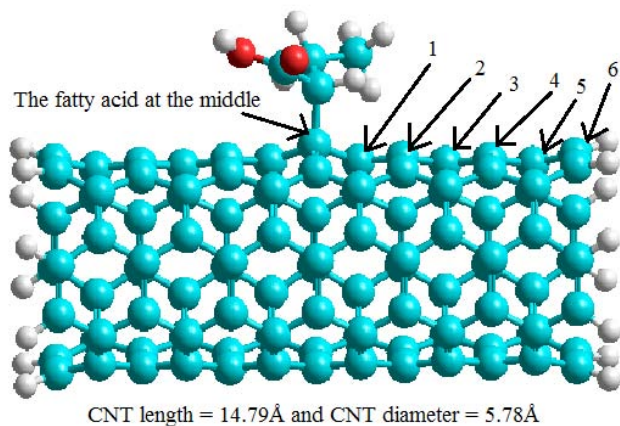


Figure 7. The positions of the C_{butryric acid}-C_{CNT} bond on the cylindrical surface of CNT that expecting.

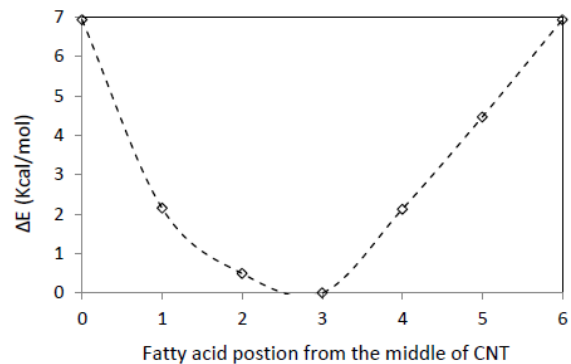


Figure 8. The relative stability of the C³-centered butyric acid radicals with CNT as a function of the position of the single covalent C_{butryric acid}-C_{CNT} bond that formed, from the middle of the CNTs forwards their two ends.

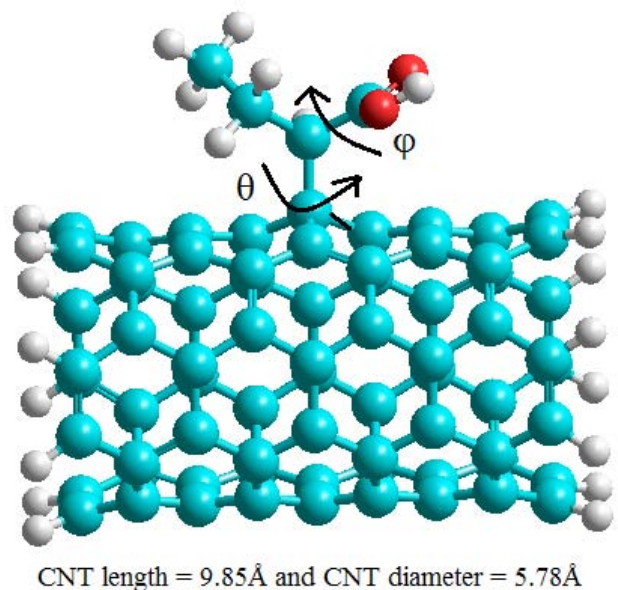


Figure 9. The rotating of the butyric acid about the C_{butryric acid}-C_{CNT} bond θ , and then rotating of the carboxyl group ϕ .

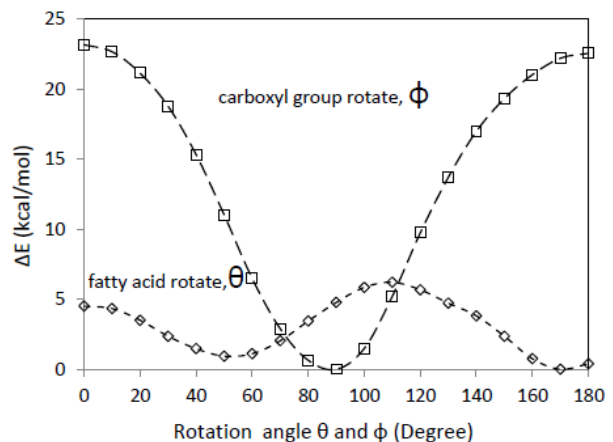


Figure 10. The relative stability of the C³-centered butyric acid radicals with CNT as a function the rotating of the butyric acid about the C_{butryric acid}-C_{CNT} bond θ , and then rotating of the carboxyl group ϕ .

The final important factor is the effect of rotating the butyric acid about the C_{butryric acid}-C_{CNT} bond by angle θ , and then rotating of the carboxyl group by angle ϕ on the relative stability ΔE , see Fig. 9, with rotating step 10°. The geometry optimized for each rotating, the butyric acid or carboxyl group, on the surface of

CNTs was calculated by PM3. Figure 10 shows fluctuated in relative stability as the angle θ increases, so there are two stable points, the first at $\theta = 50^\circ$ and the second at $\theta = 170^\circ$. The range of relative stability ΔE is not high, so the thermal energy may be able to do this rotation. While the rotating of the carboxyl group shows wide change in ΔE compare with the θ . Where the highest stability at $\varphi = 90^\circ$. The rotating of carboxyl group φ shows higher effected on the relative stability compare with the increasing of the θ angle.

CONCLUSIONS

We have performed PM3 calculations of the structural properties of CNT upon adsorption of various fatty acids (butyric acid radicals). Among these three isomers, the C³-centered butyric radical forms stable complexes with CNT. The results of the diameter and length of the CNT on the binding energies with C³-centered butyric show a decrease as the CNT diameter increases, while the binding energies increase with CNT length increase. The C³-centered butyric radicals are shown to prefer to bond at the half distance between the middle and one of their two ends of the CNT cylindrical surface. The stereo geometry (curvature of CNT surface) between the butyric radicals and CNT may limit the binding energies behaviour. Also, there was a good agreement between the PM3 calculations and other calculations in terms of energies [23,24,35,36].

Technol. **22**, 2061 (2004).

[9] S. Iijima, Nature **354**, 56 (1991).

[10] M. Terrones, W. Hsu, H. Kroto, D. Walton, Top. Curr. Chem. **199**, 189 (1999).

[11] M. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P. Eklund, *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes*, (Academic Press, New York, 1996).

[12] S. Tsang, Y. Chen, P. Harris, M. Green, Nature **372**, 159 (1994).

[13] J. Davis, M. Green, O. Hill, Y. Leung, P. Sadler, J. Sloan, A. Xavier, S. Tsang, Inorg. Chim. Acta **272**, 261 (1998).

[14] F. Balavoine, P. Schultz, C. Richard, V. Mallouh, T. Ebbesen, C. Mioskowski, Angew. Chem. Int. Ed. **38**, 1912 (1999).

[15] Z. Guo, P. Sadler, S. Tsang, Adv. Mater. **10**, 701 (1998).

[16] A. Bianco, M. Prato, Adv. Mater. **15**, 1765 (2003).

[17] D. Pantarotto, C. Partidos, R. Graff, J. Hoebeke, J. Briand, M. Pratto, A. Bianco, J. Am. Chem. Soc. **125**, 6160 (2003).

[18] N. Venkatesan, J. Yoshimitsu, Y. Ito, N. Shibata, K. Takada, Biomaterials **26**, 7154 (2005).

[19] M. Panthuis, Chem. Biol. **10**, 897 (2003).

[20] V. Basiuk, J. Phys. Chem. B **107**, 8890 (2003).

[21] S. Gustavsson, A. Rosen, K. Bolton, Nano Lett. **3**, 265 (2003).

[22] A. Mavrandonakis, G. Froudakis, S. Farantos, Rev. Adv. Mater. Sci. **11**, 88 (2006).

[23] M. Al-anber, J. Macro. Sci. B **50** 2481 (2011).

[24] M. Al-anber, A. Ali, S. Resan, A. Al-mouali, Int. J. Green Nano. **3**, 238 (2011).

[25] F. Van Immerseel, F. Boyen, I. Gantois, L. Timbermont, L. Bohez, F. Pasmans, F. Haesebrouck, R. Ducatelle, Poultry Science **84**, 1851 (2005).

[26] M. Zimmerman, N. Singh, P. M. Martin, M. Thangaraju, V. Ganapathy, J. Waller, H. Shi, K. Robertson, D. Munn, K. Liu, Am. J. Phys. Gastr. Liver Phys. **302**, 1405 (2012).

[27] S. Vanhoutvin, F. Troost, H. Hamer, P. Lindsey, G. Koek, D. Jonkers, A. Kodde, K. Venema, R. Brummer, PLoS ONE **4**, 6759 (2009).

[28] K. Tanaka, T. Yamabe, K. Fukui, *The Science and Technology of Carbon Nanotubes*, (Elsevier, Amsterdam, 1999).

[29] M. Al-anber, Z. Abdalla, A. Salih, Fizika A **17**, 151 (2008).

[30] M. Al-anber, Int. J. Pure App. Phys. **7**, 251 (2011).

[31] J. Stewart, J. Comput. Chem., **10**, 209 (1989).

[32] J. Stewart, J. Comput. Chem. **10**, 221 (1989).

[33] J. Stewart, J. Mol. Model. **13**, 1173 (2007).

[34] J. Stewart, J. Mol. Model. **19**, 1 (2013).

[35] Y. Huang, L. Guler, J. Heidbrink, H. Kenttamaa, J. Am. Chem. Soc. **127**, 3973 (2005).

[36] D. Yu, A. Rauk, D. Armstrong, J. Am. Chem. Soc. **117**, 1789 (1995).

[1] S. Iijima, T. Ichihashi, Nature **363**, 603 (1993).

[2] D. Bethune, C. Klang, M. Vries, G. Gorman, R. Savoy, J. Vazquez, R. Beyers, Nature **363**, 605 (1993).

[3] M. Tomita, Y. Saito, T. Hayashi, Jpn. J. Appl. Phys. **32**, 280 (1993).

[4] P. Ajayan, J. Lambert, P. Bernier, L. Barbedette, C. Colliex, J. Planeix, Chem. Phys. Lett. **215**, 509 (1993).

[5] J. Lambert, P. Ajayan, P. Bernier, J. Planeix, V. Brotons, B. Coq, J. Castaing, Chem. Phys. Lett. **226**, 364 (1994).

[6] A. Thess, R. Lee, P. Nikolaev, H. Dai, P. Petit, J. Robert, C. Xu, Y. Lee, S. Kim, A. Rinzler, D. Colbert, G. Scuseria, D. Tomanek, J. Fischer, R. Smalley, Science **273**, 483 (1996).

[7] T. Guo, P. Nikolaev, A. Thess, D. Colbert, R. Smalley, Chem. Phys. Lett. **243**, 49 (1995).

[8] S. Witanachchi, P. Mahawela, P. Mukherjee, J. Vac. Sci.

SOBRE LA HABITABILIDAD DE EXOPLANETAS ORBITANDO A PRÓXIMA DEL CENTAURO

ON THE HABITABILITY OF EXOPLANETS ORBITING PROXIMA CENTAURI

M. LÓPEZ-ÁGUILA, R. CÁRDENAS-ORTIZ Y L. RODRÍGUEZ-LÓPEZ

Laboratorio de Ciencia Planetaria. Dpto. Física, Universidad Central "Marta Abreu" de Las Villas, Santa Clara. Cuba

(Recibido 21/5/2013; Aceptado 20/11/2013)

En este trabajo se aplica un modelo matemático de fotosíntesis para estimar la habitabilidad de un planeta hipotético orbitando Próxima del Centauro dentro de la zona de habitabilidad. Los resultados sugieren viabilidad apreciable para la productividad biológica, si los organismos presentes han evolucionado hasta desarrollar la capacidad de utilizar luz infrarroja para la fotosíntesis.

We apply a mathematical model for photosynthesis to quantitatively assess the habitability of a hypothetical planet orbiting Proxima Centauri, inside the so called habitability zone. Results suggest significant viability for primary biological productivity, provided living organisms have evolved to reach the ability of using infrared light for photosynthesis.

PACS: Astrobiology, *91.62.Fc and 96.55.+z. Photosynthesis in oceanography, 92.20.Cm and *92.20.ch

I. INTRODUCCIÓN

Alrededor del 75% de las estrellas de la Vía Láctea son enanas rojas [1]. Como éstas son pequeñas y frías, tienen la zona de habitabilidad en un rango pequeño y es posible que los planetas que se encuentren orbitando en esta zona estén en anclaje de marea [2,3], lo cual implica potenciales complicaciones climáticas debidas al drenaje de energía térmica del hemisferio iluminado al oscuro. A esta último se suman las frecuentes emisiones de rayos X [4]. Todo lo anterior sugiere que la probabilidad de albergar vida en planetas alrededor de estas estrellas es baja. Sin embargo, dada su abundancia, se continúan estudios en esta dirección [1].

Próxima del Centauro es la estrella más cercana al Sol, y por esto es estudiada por varios observatorios [5]. Es una estrella enana roja y el 85% de la radiación que emite es en la parte del espectro que corresponde al infrarrojo [6].

En este trabajo se calculan las tasas de fotosíntesis del fitoplancton en un océano en calma y en un océano con corrientes verticales circulares (circulación de Langmuir) de un planeta hipotético que orbita en la zona habitable de Próxima del Centauro.

II. MATERIALES Y MÉTODOS

2.1. Modelo de emisión estelar El espectro de emisión de una estrella se puede aproximar al del cuerpo negro, por ello se hace uso de la ley de Planck para obtener las irradiancias espectrales $E_{star}(\lambda)$ emitidas por la estrella:

$$E_{star}(\lambda) = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{k_b T \lambda}} - 1}, \quad (2.1)$$

donde h es la constante de Planck, c es la velocidad de la luz en el vacío, λ es la longitud de onda de la radiación, k_b es la constante de Boltzmann y T es la temperatura efectiva de la estrella (3042 ± 117 K) [6].

Se considera también que el medio interplanetario es transparente, y que los frentes de onda esféricos salidos de la fotosfera caen con el cuadrado de la distancia. Entonces las irradiancias espectrales $E_{top}(\lambda)$ en el tope de la atmósfera del planeta son:

$$E_{top}(\lambda) = \left(\frac{R}{r}\right)^2 E_{star}(\lambda), \quad (2.2)$$

donde R es el radio de Próxima del Centauro, estimada en unos $0.145 \pm 0.011 R_s$ [6] (R_s es el radio del Sol) y r es la distancia entre la estrella y el planeta, la cual se tomó como 0.1 unidades astronómicas (u.a.).

2.2. Modelo atmosférico Se asumió una atmósfera similar a la de la Tierra actual, con un albedo $A_m = 0,4$ para la radiación infrarroja (que es la dominante en el espectro de Próxima del Centauro). Para hallar las irradiancias espectrales $E(\lambda, 0^+)$ que llegan a la superficie del océano se utiliza la fórmula:

$$E(\lambda, 0^+) = (1 - A_m) E_{top}(\lambda). \quad (2.3)$$

Parte de la radiación que llega a la superficie oceánica es reflejada, por lo que las irradiancias $E(\lambda, 0^-)$ que llegan a la coordenada inmediatamente debajo de la superficie del océano

se calculan mediante:

$$E(\lambda, 0^-) = [1 - R_f]E(\lambda, 0^+), \quad (2.4)$$

donde R_f es el coeficiente de reflexión, obtenido de las fórmulas de Fresnel aplicado a la interferencia aire-agua. En este estudio se asume que el ángulo solar cenital es de cero grado, y se tiene entonces que $R_f \approx 0,02$.

Es conveniente además, multiplicar las irradiancias espectrales ultravioletas (UV) por el coeficiente de acción biológica para la inhibición de la fotosíntesis $\varepsilon(\lambda)$ [7] de la radiación ultravioleta, quedando de la siguiente forma:

$$E_{UV}^*(\lambda, 0^-) = \varepsilon(\lambda)E(\lambda, 0^-). \quad (2.5)$$

La función biológica $\varepsilon(\lambda)$ es un espectro de acción generalizado para la inhibición de la fotosíntesis y el daño del DNA del fitoplancton. El asterisco en las irradiancias ultravioletas significa que están ponderadas con un espectro de acción biológica.

2.3. Modelo óptico oceánico Las irradiancias para la luz fotosintéticamente activa que hay a diferentes profundidades z en el océano se calculan según la ley de Lambert-Beer [8]:

$$E(\lambda, z) = E(\lambda, 0^-) \cdot e^{-K(\lambda)z}, \quad (2.6)$$

donde $K(\lambda)$ es el coeficiente de atenuación de la luz para la longitud de onda λ .

Se usó la clasificación del agua oceánica de acuerdo a sus propiedades ópticas dadas por el oceanólogo N. Jerlov [4,9]. Las aguas claras son del tipo I, las intermedias son del tipo II y las aguas turbias son del tipo III [4,9]. En la referencia [4] se muestra un gráfico con los coeficientes de atenuación vs. longitud de onda para los tipos ópticos de aguas oceánicas.

2.4. Patrón de circulación oceánica Primero se calcularon las tasas de fotosíntesis para el océano en calma, y después se promediaron en celdas de 40 metros de profundidad (divididas en varias capas), considerando un patrón de corrientes verticales circulares (circulación de Langmuir).

2.5. Modelo de Fotosíntesis Para hallar las tasas de fotosíntesis se utilizó el modelo E para la fotosíntesis [10,11]:

$$\frac{P(z)}{P_s} = \frac{1 - e^{-E_{LFA}(z)/E_s}}{1 + E_{UV}^*(z)}, \quad (2.7)$$

donde $P(z)$ es la tasa de fotosíntesis del fitoplancton a la profundidad z , P_s es la tasa de fotosíntesis máxima y:

$$E_{LFA}(z) = \sum_{\lambda_i}^{\lambda_f} E_i(\lambda, z)\Delta\lambda \quad (2.8)$$

y

$$E_{UV}^*(z) = \sum_{\lambda_i}^{\lambda_f} E_i^*(\lambda, z)\Delta\lambda \quad (2.9)$$

son las irradiancias totales para la luz fotosintéticamente activa (LFA, 400-1100 nm) y la radiación ultravioleta (UV, 280-399 nm) a la profundidad z . El parámetro E_s mide la eficiencia de las especies en usar LFA: mientras más pequeño es, mayor es la eficiencia de las especies en usar LFA. En ausencia de luz ultravioleta, el denominador de la ecuación (2.7) toma el valor 1, de donde se desprende que E_s representa la irradiancia de LFA para la cual la tasa de fotosíntesis alcanza el 63% de su valor máximo. Las especies de fitoplancton tienen un valor de E_s en el rango (2 – 100) W/m². Para caracterizar este rango, en nuestros cálculos hemos tomado el valor máximo ($E_s = 100$ W/m²) y el mínimo ($E_s = 2$ W/m²) de este parámetro, que representa las especies menos eficientes y más eficientes, respectivamente, en usar LFA. En ambos casos $\Delta\lambda = 1$ nm. Es de destacar que se asume que los organismos en el exoplaneta podrían utilizar luz infrarroja para la fotosíntesis (hasta $\lambda_{max} \approx 1100$ nm), no solo porque será la radiación electromagnética más común allí, sino porque en la Tierra ya se han descubierto unas pocas especies que fotosintetizan con el IR en el mencionado rango [12]. Además, longitudes de onda superiores podrían imponer requerimientos bioenergéticos mayores para lograr una cadena de transformación energía solar-energía química eficiente.

Se calculó después el promedio de la tasa de fotosíntesis $\left\langle \frac{P}{P_s} \right\rangle$ para las N capas que conforman la celda superior del océano, de 40 metros de profundidad (llamada capa límite, debido a que solo en ella se asume circulación). La tasa de fotosíntesis promedio resulta de:

$$\left\langle \frac{P}{P_s} \right\rangle = \frac{\sum_{n=1}^N \frac{P}{P_s}(n)}{N}. \quad (2.8)$$

III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En las Figuras 1-3 se muestran las tasas de fotosíntesis de los tres tipos de aguas I, II y III. Como podemos apreciar en los tres gráficos para los tres tipos de agua se alcanza el máximo de la tasa de fotosíntesis en la superficie del océano.

Estos gráficos son diferentes a los que se obtienen para cuando el planeta estudiado es la Tierra [13-15], básicamente debido a las diferencias en los espectros de emisión de ambas estrellas. El Sol emite bastante radiación en las bandas ultravioleta y visible. La radiación ultravioleta es una de las causantes de inhibir la fotosíntesis, ya que es una radiación más energética que el visible y el infrarrojo y tiende a dañar el ADN y el aparato fotosintético de las moléculas. Por eso en la superficie de los océanos de nuestro planeta no se alcanza un máximo de fotosíntesis, porque el fitoplancton está más expuesto a estas radiaciones dañinas. El agua es un bloqueador de las radiaciones, entonces en capas de aguas por debajo de la superficie, donde ya han sido absorbidas las radiaciones más energéticas, el fitoplancton puede realizar mayor tasa de fotosíntesis.

A diferencia del Sol, Próxima del Centauro emite más radiación infrarroja que ultravioleta y visible, por eso la tasa

de fotosíntesis alcanza el máximo en la superficie del océano, ya que prácticamente no hay radiación inhibitoria que dañe las biomoléculas.

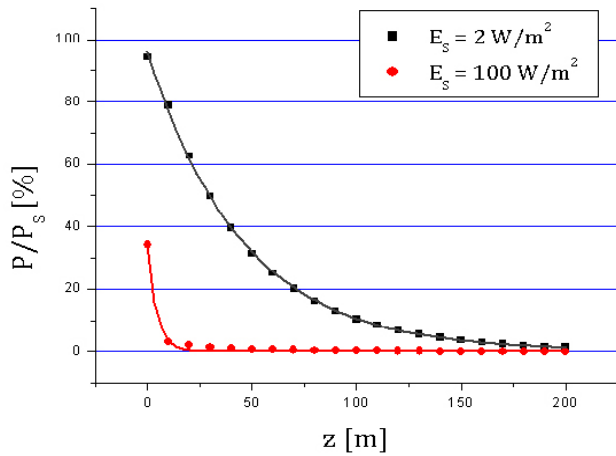


Fig. 1 Tasas de fotosíntesis en aguas tipo I (claras) vs. profundidad

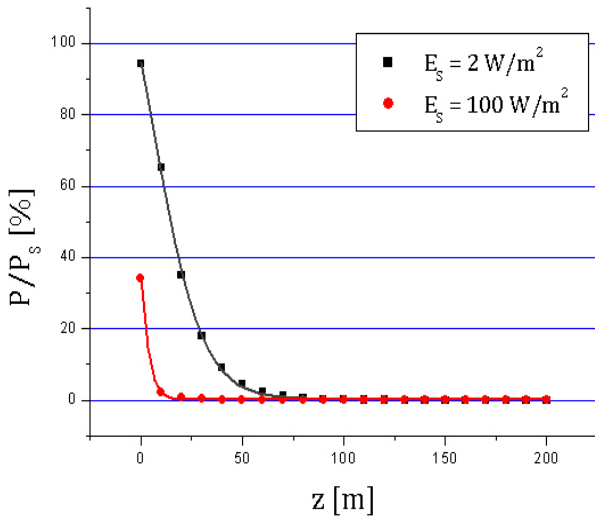


Fig. 2 Tasas de fotosíntesis en aguas tipo II (intermedias) vs. profundidad

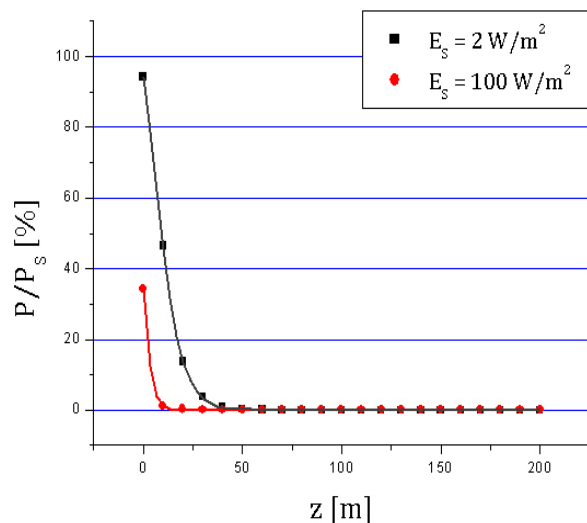


Fig. 3 Tasas de fotosíntesis en aguas tipo III (turbias) vs. profundidad

Los organismos muy poco eficientes en usar LFA ($E_s = 100 \text{ W/m}^2$) presentan muy bajas tasas de fotosíntesis en los tres tipos de agua, mientras que los organismos más eficientes logran una tasa apreciable de fotosíntesis incluso a varias decenas de metros de profundidad.

En la tabla 1 se muestra el promedio de la tasa de fotosíntesis. Se obtiene mayor tasa de fotosíntesis en las aguas claras.

Tabla 1	
Promedio de la tasa de fotosíntesis.	
$E_s = 2 \text{ W/m}^2$	
Tipo de Aguas	$\left\langle \frac{P}{P_s} \right\rangle$
Aguas Claras (tipo I)	51,7
Aguas Intermedias (tipo II)	34,0
Aguas Turbias (tipo III)	22,7

Comparando con datos del planeta Tierra (Tabla 2) se observa que el promedio es considerablemente más alto que en el exoplaneta.

Tabla 2	
Promedio de la tasa de fotosíntesis para la Tierra.	
$E_s = 2 \text{ W/m}^2$	
Tipo de Aguas	$\left\langle \frac{P}{P_s} \right\rangle$
Aguas Claras (tipo I)	75,9
Aguas Turbias (tipo III)	79,1

Se obtiene para el planeta Tierra que el promedio de la tasa de fotosíntesis es más alto en aguas turbias que en aguas claras, esto se debe a que estos cálculos fueron hechos para los 40 primeros metros de profundidad del océano, y el UV inhibe la fotosíntesis en las primeras decenas de metros de profundidad para las aguas claras en la Tierra.

IV. CONCLUSIONES

Los resultados sugieren que en principio podría ser posible la vida fotosintética en un exoplaneta que orbite una enana roja si los organismos allí presentes evolucionan la capacidad de utilizar el infrarrojo para fotosintetizar. La productividad obtenida es considerablemente menor que en la Tierra actual, pero no es baja. Para estimar la habitabilidad, hemos mostrado una arista esencialmente fotobiológica. Otras variables ambientales podrían jugar un rol importante, lo cual es objeto de futuros estudios en nuestro grupo.

[1] Jill C. Tarter, Peter R. Backus, Rocco L Mancinelli, *Astrobiology* 7, 30 (2007)

- [2] R. Barnes, Sean N. Raymond, B. Jackson, R. Greenberg, *Astrobiology* **8**, 557 (2008).
- [3] Timothy M. Merlis, T. Schneider, *Journal of Advances in Modeling Earth System* **2**, 1 (2010)
- [4] L. Peñate, R. Cárdenas, O. Martín, *International Journal of Modern Physics E* **20**, 37 (2011).
- [5] H. Lammer, *Astrobiology* **7**, 27 (2007)
- [6] http://en.wikipedia.org/Proxima_Centaury
- [7] C. S. Cockell, *Origins of Life and Evolution of Biospheres* **30**, 467 (2000)
- [8] J. B. Tatum, *Stellar Atmospheres*, (Lecture Notes-T-123S)
- [9] K. Shifrin, *Physical optics of ocean water*, (American Institute of Physics, New York, 1988)
- [10] J. Cullen, P. Neale, M. Lesser, *Science* **258**, 646 (1992).
- [11] J. Fritz, P. Neale, R. Davis, J. Peloquin, *Marine Ecology Progress Series* **365**, 1 (2008).
- [12] N. Pérez, R. Cárdenas, O. Martín, M. Leiva-Mora, *Astrophysics and Space Science* **343**, 7 (2013)
- [13] L. Rodríguez, R. Cárdenas, O. Rodríguez, *International Journal of Astrobiology* **12**, 326 (2013).
- [14] D. Ávila, R. Cárdenas, O. Martín, *Origins of Life and Evolution of Biospheres* **43**, 67 (2013).
- [15] L. Peñate, O. Martín, R. Cárdenas, S. Agustí, *Astrophysics and Space Science* **330**, 211 (2010)

POSSIBILITIES OF LIFE AROUND ALPHA CENTAURI B

POSIBILIDADES DE VIDA ALREDEDOR DE ALFA CENTAURO B

A. GONZÁLEZ^{a †}, R. CÁRDENAS-ORTIZ^{a †} AND J. HEARNshaw^{b *}

a) Departamento de Física, Universidad Central "Marta Abreu" de Las Villas, Cuba. agnoa@uclv.cu[†]; rcardenas@uclv.edu.cu[†]

b) Department of Astronomy, University of Canterbury, New Zealand. john.hearnshaw@canterbury.ac.nz^{*}

[†] corresponding author

(Recibido 12/2/2013; Aceptado 5/12/2013)

We make a preliminary assessment on the habitability of potential rocky exoplanets around Alpha Centauri B. We use several indexes: the Earth Similarity Index, a mathematical model for photosynthesis, and a biological productivity model. Considering the atmospheres of the exoplanets similar to current Earth's atmosphere, we find consistent predictions of both the Earth Similarity Index and the biological productivity model. The mathematical model for photosynthesis clearly failed because does not consider the temperature explicitly. For the case of Alpha Centauri B, several simulation runs give 11 planets in the habitable zone. Applying to them above mentioned indexes, we select the five exoplanets more prone for photosynthetic life; showing that two of them in principle have better conditions than Earth for this kind of life.

Se hace una estimación preliminar de la habitabilidad de potenciales exoplanetas rocosos en el sistema Alfa del Centauro B. Se usan varios índices de habitabilidad: el Índice de Similaridad con la Tierra, un modelo matemático de fotosíntesis, y un modelo de productividad biológica. Considerando las atmósferas de los exoplanetas similares a la actual de la Tierra, se encuentran predicciones consistentes del Índice de Similaridad con la Tierra y el modelo de productividad biológica. El modelo matemático de fotosíntesis falló, al no considerar la temperatura explícitamente. Para el sistema Alfa del Centauro B, varias simulaciones computacionales predicen la potencial formación de 11 exoplanetas en la zona habitable. Aplicando los mencionados índices, se seleccionan los cinco exoplanetas con mayor potencial para la vida fotosintética; mostrándose que dos de ellos en principio tienen mejores condiciones para este tipo de vida que la Tierra actual.

PACS: Extrasolar planets, 97.82.-j; Radiative transfer in atmosphere, 42.68.Ay; Ocean optics, 42.68.Xy; Photosynthesis in oceanography, 92.20.Cm

INTRODUCTION

The stellar system Alpha Centauri is nowadays one of the main targets in the search for life in our cosmic neighborhood, as it is the closest to the Solar System and observations indicate the absence of gaseous giant planets (potential absorbers of the rocky ones).

On the other hand, computer simulations show the possibility of the existence of several Earth-like planets in the habitable zone of Alpha Centauri B [1]. In this paper we present a preliminary assessment concerning the habitability of exoplanets predicted in the above reference.

MATERIALS AND METHODS

Planetary Models We use the results of computer simulations presented in [1]. The number and characteristics of exoplanets depend on the quantity of protoplanets assumed at the start of the simulations. In above mentioned paper, authors present the results of 8 computer simulations, which give as a result the formation of 21 planets. For the characteristics of the predicted planets, we recommend the reader to check [1].

Of the above mentioned 21 planets, we considered in our

calculations only those 11 that are inside the zone of habitability of the star (according to the standard opinion of the presence of liquid water in the planetary surface).

Habitability indexes We use three indexes to assess the possibilities for life: the Earth Similarity Index, the P model for biological productivity, and the E model for photosynthesis.

The Earth Similarity Index (*ESI*) was developed in the Habitability Lab of the University of Puerto Rico at Arecibo [2]. It is defined as

$$ESI = \prod_{i=1}^n \left(1 - \frac{|x_i - x_{i0}|}{x_i + x_{i0}} \right)^{\frac{w_i}{n}}, \quad (1)$$

where x_i is a planetary property, x_{i0} is its value on Earth today, w_i is a weight exponent and n is the number of planetary properties. The weights of the properties considered are summarized in Table I below.

Environmental variables considered in the Earth Similarity Index		
Planetary property	Reference value	Weight exponent
Surface temperature	288 K	5,58
Escape velocity	1,0 E. u. (Earth units)	0,70
Mean radius	1,0 E. u.	0,57
Bulk density	1,0 E. u.	1,07

Not all above properties are independent, but actually the set is designed to consider two environments of the planet: outer and inner. Surface temperature and escape velocity account for the speed of biochemical reactions at planet's surface and for retention of the atmosphere (outer *ESI*), while mean radius and bulk density account for geodynamics (inner *ESI*).

Earth-like planets can be defined as any planetary body with a similar terrestrial composition and a temperate atmosphere. This means that the planet is rocky in composition (silicates) and has an atmosphere suitable for most terrestrial vegetation, including complex life.

Current Earth gives $ESI = 1$. Planets with *ESI* in the range 0,8-1 are considered capable of hosting life more or less similar to current Earth's. Those having this index in the range 0,6-0,8 (as present Mars), are either too cold or too hot, and therefore could host extremophiles. A planetary body with $ESI < 0.6$ is considered not habitable.

The Π model for biological productivity [3] is:

$$\frac{\Pi}{\Pi_{\max}} = \left(1 - \left(\frac{T_{opt} - T_s}{T_{opt} - 273} \right)^2 \right) f(p_{CO_2}), \quad (2)$$

where Π is the biological productivity, Π_{\max} is the maximum possible bio-productivity, T_{opt} is the optimum temperature for life, T_s is the temperature at planet's surface and $f(p_{CO_2})$ is a function of the carbon dioxide pressure in the atmosphere (because this gas is needed for photosynthesis). In this work we are using a similar model atmosphere for all exoplanets: current Earth's. Therefore, the numerical value for $f(p_{CO_2})$ is assumed to be the same for all them. It is obtained assuming $T_{opt} = 298$ K and average current Earth's conditions: $T_s = 288$ K and $\Pi/\Pi_{\max} = 0,5$ [3].

The E model for photosynthesis is:

$$\frac{P}{P_s}(z) = \frac{1 - \exp[-E_{PAR}(z)/E_s]}{1 + E_{UV}^*(z)}, \quad (3)$$

where $P(z)$ is the phytoplankton photosynthesis rate at depth z in the ocean, P_s is the maximum possible photosynthesis rate, $E_{PAR}(z)$ and $E_{UV}^*(z)$ are the spectral irradiances of photosynthetically active radiation (PAR, 400-700 nm) and ultraviolet radiation (UV, 280-399 nm) at depth z , and E_s is a parameter measuring the efficiency of the species in using PAR. The asterisk in the ultraviolet irradiance means that spectral UV irradiances are weighted with a biological action spectrum. This is called the *E* model for photosynthesis (because of its use of irradiances *E*, instead of fluences *H*).

Stellar emission model The emission spectrum of Alpha Centauri B was obtained using the computer code Spectrum, a stellar spectral synthesis code [4]. The atmospheric model of Kurucz was used [5], with effective temperature $T_{eff} = 5316$ K, metallicity $[Fe/H] = 0,25$; $\log g = 4,44$ and microturbulence $\xi = 1,28$ km/s.

It was then assumed a transparent medium between Alpha Centauri B and the top of planetary atmospheres, obtaining the corresponding solar (stellar) constant through:

$$E_{top} = \left(\frac{r}{R} \right)^2 E_{star}, \quad (4)$$

where r is the radius of Alpha Centauri B, R is its distance to the top of the planetary atmosphere, and E_{star} and E_{top} are the irradiances emitted by the star and the one at the top of planet's atmosphere, respectively.

Climate model Temperatures T_s at planetary surfaces were calculated using the zero-dimensional climatic model:

$$\frac{E_{top}}{4} (1 - A_{in}) = (1 - A_{out}) \sigma T_s^4. \quad (5)$$

In above equation A_{in} and A_{out} are the exoplanet atmospheric albedos to incoming and outgoing radiations, and σ is the Steffan-Boltzmann constant.

Ocean optical models We use a classification of ocean water according to its optical properties, after extensive experimental works of oceanographer N. Jerlov [6]. He measured attenuation coefficients $K(\lambda)$ of the world ocean in many areas, obtaining a robust classification of ocean water bodies: type I (clearest), type II (intermediate) and type III (darkest). As the reported values of $K(\lambda)$ were given at intervals of 25 nm, we made a linear interpolation to obtain the values for every nanometre in the wavelength range used (280-700 nm). These coefficients were then used to obtain ultraviolet and photosynthetically active irradiances $E_{PAR}(z)$ and $E_{UV}^*(z)$ down the water column, needed to calculate photosynthesis rates (eq. 3). We use a biological action spectrum to account for the photosynthesis inhibition of ultraviolet radiation (thus the asterisk in $E_{UV}^*(z)$). We refer the reader to the work by some of us [7] for details on these calculations.

RESULTS AND DISCUSSION

Tables II and III show results of our computations. We see that the photosynthesis model is related practically in a linear way with planetary surface temperature, giving good photosynthesis rates even in boiling oceans, as in the case for planet c1. This is because; having the same atmosphere, hotter planets would be closer to Alpha Centauri B, receiving more PAR. They would also get more UV, but as it is preferentially attenuated in the upper layer of the ocean, the effect of the increase of PAR is dominant. Figures 1 and 2 illustrate this effect.

Planet	T_s [K]	Π/Π_{\max}	<i>ESI</i>
a1	291	0,55	0,92
a5	290	0,54	0,93
a6	271	0	0,87
a8	267	0	0,91
b2	336	0	0,86

b3	349	0	0,74
b4	285	0,44	0,92
b7	310	0,43	0,91
b8	364	0	0,68
c1	373	0	0,77
c3	282	0,37	0,91

Table III
Numerical values for average photosynthesis rates in exoplanets around Alpha Centauri B

Planet	Water type I	Water type II	Water type III
a1	0,72	0,51	0,36
a5	0,72	0,51	0,36
a6	0,68	0,48	0,34
a8	0,67	0,47	0,34
b2	0,77	0,57	0,40
b3	0,78	0,58	0,40
b4	0,71	0,50	0,35
b7	0,75	0,54	0,38
b8	0,79	0,60	0,41
c1	0,80	0,60	0,42
c3	0,70	0,50	0,35

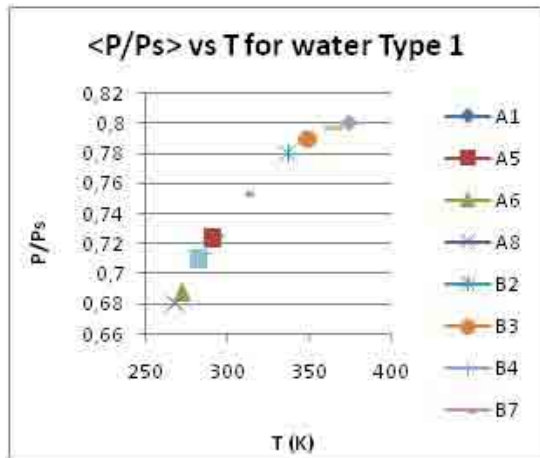


Figure 1: Photosynthesis rates in ocean water type I vs. surface planetary temperature

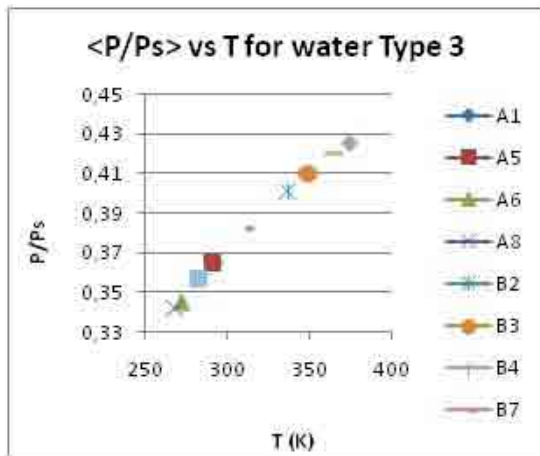


Figure 2: Photosynthesis rates in ocean water type III vs. surface planetary temperature

It can be considered that the Earth Similarity Index (*ESI*) is a good measure of habitability, but this is an index referred to current Earth, which acknowledgeable is not in its maximum potential for life. Actually, the normalized value Π/Π_{\max} for current Earth is estimated to be 0.5 [3]. According to *ESI*, the planets a1, a5, a6, a8, b2, b4, b7 and c3 can host “ordinary Earth-like” life (because its *ESI* falls in the range 0,8 -1,0). The remaining planets (b3, b8 and c1) have *ESI* in the range 0,6 - 0,8; so they could host extremophiles.

The bio-productivity model Π/Π_{\max} is more restrictive, as it by definition considers that life is possible only in the temperature range 0-50 degrees Celsius (provided $T_{opt} = 298$ K). However, it is noticeable that the five planets giving biological productivity Π/Π_{\max} different from zero coincide with those with highest *ESI* (Table II).

Given the coincident pattern in *ESI* and Π/Π_{\max} , it seems clear that the five exoplanets with Π/Π_{\max} different from zero are actually the more suitable for life around Alpha Centauri B.

On another hand, the photosynthesis model clearly fails because it does not consider the surface planetary temperature explicitly.

CONCLUSIONS

Considering the coincident pattern of *ESI* and Π bio-model, in this first preliminary assessment we conclude that potential rocky planets a1, a5, b4, b7 and c3 have good potential to harbour photosynthetic life not very different from Earth's, at planetary scale. Planets a1 and a5 seem to have slightly better potential than current Earth, as its normalized Π index is greater than 0,5.

The correct inclusion of temperature in the photosynthesis model could yield a third habitability index which might serve as a consistency check of our calculations; this shall be one of our future research directions.

[1] M. Guedes, E.J.Rivera, E. Davis, G. Laughlin, E. V. Quintana and D. A. Fischer, *ApJ* **679**, 1582 (2008).
 [2] A. Mendez, in *Proceedings of NASA's Astrobiology Science Conference* (2010) (www.lpi.usra.edu/meetings/abscicon2010/pdf/5483.pdf).
 [3] T. Volk, *Am. J. Sci.* **287**, 763 (1987).
 [4] <http://www.appstate.edu/~grayro/spectrum/spectrum.html>
 [5] R. L. Kurucs, *Special Report*, (Smithsonian Astrophysical Observatory, 1970).
 [6] N. G. Jerlov, *Marine Optics*, 2nd Ed. (Elsevier Scientific Publishing Company, Amsterdam, 1976).
 [7] L. Peñate, O. Martin, R. Cardenas and S. Agusti, *Astrophys Space Sci* **330**, 211 (2010).

LASER INDUCED FLUORESCENCE: APPLICATION TO SPECTROSCOPY AND NEW MICROSCOPY IMAGING METHODS*

FLUORESCENCIA INDUCIDA POR LÁSER: APLICACIÓN A LA ESPECTROSCOPÍA Y NUEVOS MÉTODOS DE IMAGINERÍA MEDIANTE MICROSCOPÍA*

J. -P. GALAUP

Laboratoire Aimé Cotton CNRS and Paris 11 University, France jean-pierre.galaup@lac.u-psud.fr[†]

[†] corresponding author

(Recibido 13/4/2012 ; Aceptado 2/4/2013)

Laser induced fluorescence is one of the light using techniques which allows the highest sensitivity for atoms and molecules detection, up to the single atom or single molecule level. This field is much too large for an extensive review; therefore we have chosen to focus on two main points: 1- the observation of laser stimulated fluorescence in phthalocyanine and porphyrin like molecules in rare gas and nitrogen matrices at low temperatures. 2- the presentation of laser induced fluorescence techniques suitable for achieving ultra-high spatial resolution imaging, below the diffraction limit of conventional microscopy, thanks to highly fluorescent molecules to be used as biological markers.

La fluorescencia inducida por láser es una de las técnicas luminosas que permite una mayor sensibilidad en la detección de átomos y moléculas, al nivel de átomos o moléculas aislados. Este campo es muy amplio para una revisión exhaustiva, por tanto nos enfocaremos en dos puntos principalmente: 1- la observación de fluorescencia estimulada por láser en moléculas del tipo de la ftalocianina y la porfirina en matrices de gases raros y nitrógeno a bajas temperaturas. 2- la presentación de técnicas de fluorescencia inducida por láser adecuadas para alcanzar imágenes de ultra-alta resolución espacial, por debajo del límite de difracción de la microscopía convencional, gracias a las moléculas altamente fluorescentes que se usan como marcadores biológicos.

PACS: Fluorescence of molecules, 33.50.Dq. Stimulated emission condensed matter, 78.45.+h, Luminescence optically stimulated, 78.60.Lc.

INTRODUCTION

Spectroscopy by Laser Induced Fluorescence (LIF) allows a wide field of applications. In chemistry and physics of plasmas, LIF serve for identifying compounds and measuring absolute concentrations of atoms and molecules in a given electronic or vibronic state. Moreover, determining local temperatures and speeds of set of particles provides information on the thermodynamic state of the system explored. Since years, LIF allowed also the high resolution study of large molecules of chemical or biological interest in supersonic jets or in solid environments cooled down to liquid helium temperatures. As an example, the fluorescence excitation and dispersed fluorescence spectra of several porphyrins was observed after the gas phase sample had been cooled in a supersonic free jet [1] or the molecules were dispersed in a solid host and cooled down to very low temperatures [2].

In this short review paper, we want to mention also other interests of this technique, mainly associated with the use of fluorescence for imaging and especially of microscopic and even nanoscale objects, below the resolution limit of a conventional microscope.

* Artículos presentados en el VII Taller internacional TECNOLÁSER y III Reunión de Óptica, Vida y Patrimonio (La Habana, abril de 2012)

BASIC PRINCIPLES

A scheme of LIF spectroscopy is drawn in Figure 1.

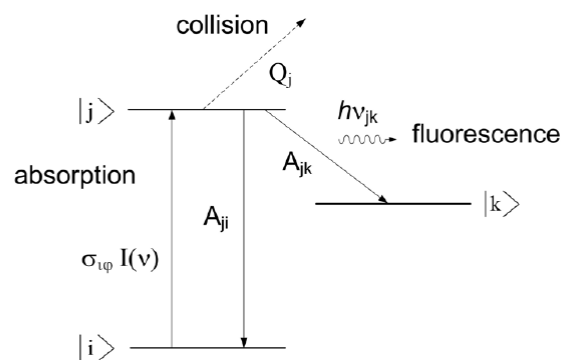


Figure 1. Schematic diagram for LIF spectroscopy. $I(v)$ corresponds to the laser beam intensity and σ is the absorption cross section. A represents the probability of spontaneous transition. Q represents the "quenching", that is to say the phenomenon of non-radiative de-excitation by collisions, phonons or other molecule-molecule interactions [3].

Selective laser optical pumping realizes the population transfer from the low level $|i\rangle$ to a higher level $|j\rangle$, and the flux of fluorescence photons emitted during the radiative relaxation from the level $|j\rangle$ to an intermediate level $|k\rangle$ is

measured. The symbolic states $|i\rangle$, $|j\rangle$ and $|k\rangle$ of the drawing can be electronic, vibronic, vibrational, rotational states of atoms, ions or molecules. In the general case of molecules, the emissive state $|j\rangle$ is the lowest singlet state whereas the $|k\rangle$ state correspond to a vibrational level of the ground state $|i\rangle$. The radiation intensity of fluorescence emitted from the $|j\rangle$ level provides information on the population of the initial state $|i\rangle$. We remind also that the measured lifetime of the fluorescence from the $|j\rangle$ level includes also the non-radiative contribution due to collision processes in gas phase or phonon perturbations or molecule-molecule interactions in solid states: one talk about the phenomenon of quenching.

Rather simple considerations allow evaluating the flux of fluorescence photons n_{fluor} . Naming N_i (respectively N_j) the density of molecules in the $|i\rangle$ (respectively $|j\rangle$) state, in the case where $N_i \gg N_j$, the total number of fluorescence photons n_{fluor} is proportional to the integral over spectral and time domains of the convolution product between the spectral profile P_{abs} of the optical transition $|j\rangle \leftarrow |i\rangle$ (absorption spectrum) and the spectral profile P_L of the laser, such that:

$$n_{fluor} = KN_i \frac{A_{jk}}{A_j + Q_j} \sigma_{ij} \iint \frac{P_{abs} \otimes P_L}{h\nu} I_L(t) d\nu dt \quad (1)$$

In this expression, K is constant of proportionality, A is the Einstein's coefficient for spontaneous emission, Q is the term for quenching, σ_{ij} is the absorption cross section and I_L is the laser intensity. As shown by this equation, the fluorescence signal depends on the lifetime τ_j of the emissive level $|j\rangle$ ($\tau_j = 1/(A_j + Q_j)$), the absorption cross section, the density of the initial state, the laser intensity and the absorption and the laser spectral profiles. Under the conditions of the linear absorption regime, the fluorescence signal varies linearly with the intensity of the laser beam. Notice that all the information concerning the $|j\rangle$ level is actually contained in the absorption profile P_{abs} .

In practice, a typical set-up for a LIF experiment is shown in Figure 2.

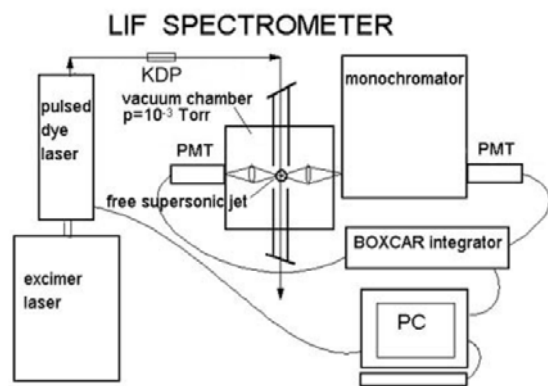


Figure 2. Typical schematic diagram for LIF experiment applied to jet cooled systems. Important is the tunable laser source constituted by a nanosecond excimer laser for pumping the dye laser eventually followed with a KDP non-linear crystal for frequency doubling [4].

The important points for such an experiment is the tunable laser source, the experimental chamber where is located the

system under study and a monochromator with a detector device. The most common laser is a nanosecond pulsed dye laser system which allows large tunability over the visible range depending on the dye used. At present, also tunable all solid laser sources using only non-linear crystals and OPO/OPA designs are under constant development. The experimental chamber can be a simple gas cell, a supersonic jet under vacuum or a cryostat for cryogenic systems. The detectors are photomultipliers, avalanche photodiodes or CCD cameras

LASER STIMULATED FLUORESCENCE

Recent luminescence works [5,6] on porphyrin and phthalocyanine-doped cryogenic matrices have revealed the occurrence of stimulated emission for specific vibronic transitions under selective laser excitation. This phenomenon was characterized by a drastic intensity increase of a specific vibronic fluorescence line with only a moderate increase of the laser pump intensity. The most concerned transition was assigned as the one taking place between the first excited electronic state and a vibrational level of the ground state located at approximately 1550 and 1525 cm^{-1} in H_2Pc and ZnPc respectively [5].

Further experiments revealed that the stimulated emission observed for phthalocyanines in cryogenic matrices is a more general behavior that was also observed in the case of porphyrin molecules belonging to the tetrabenzoporphyrin family [6]. Indeed, tetrabenzoporphyrin (TBP) molecules have the closest structure to the phthalocyanines (Pc), the most noticeable change being the replacement of the four bridging nitrogen atoms belonging to the internal ring by carbon atoms. Therefore, similar vibronic structures are expected between both species.

We summarize here the most important results obtained. Laser Induced Fluorescence spectroscopy is very well adapted for studying these molecules because most of their absorption bands in the visible region closely match the working range of tunable dye lasers. While undertaking such LIF on matrix-isolated free-base phthalocyanine (H_2Pc) and zinc phthalocyanine (ZnPc), by means of emission-excitation spectra using pulsed dye lasers for excitation, an unusually intense vibronic band was observed with slightly increased laser power. This novel solid state effect, which had never been reported before, was the subject of our previous paper [5]. The band involved corresponded to the transition from the first excited electronic state to a vibrational level of the ground state at approximately 1550 cm^{-1} . The drastic intensity enhancement was attributed to the occurrence of stimulated emission (SE) on the basis of the following observations: 1- the laser power dependence of the phenomenon exhibits a well-defined threshold, 2- there is also a threshold as a function of the concentration of dopants, 3- the emission band is narrow compared to the spectral width of the standard fluorescence, even in the case of broad bands in the absorption spectrum, 4- its lifetime is shortened greatly in comparison with other

vibronic transitions of the emission spectrum and exhibits a perfect synchronism with the exciting laser pulses [5].

Experimental details are fully described in previous published papers and most significant recent results obtained for H₂TBP and ZnTBP isolated in Ar and N₂ hosts are briefly presented and discussed below.

First, we can ascertain that the absorption spectrum of H₂TBP/Ar corresponds to well-isolated guest molecules. The two main bands appearing at about 654 nm (15284 cm⁻¹) and 584 nm (17132 cm⁻¹) belong to absorptions of the split Q band, frequently labeled as the Q_x and Q_y bands respectively, in order of increasing energy. The two corresponding bands in the H₂Pc/Ar absorption spectrum are located at about 677 nm (14771 cm⁻¹) and 635 nm (15748 cm⁻¹). The shift of the absorption bands observed between H₂TBP and H₂Pc results from the change in energy of the molecular orbitals due to the replacement of the interpyrrolic carbons by the nitrogen atoms. As a consequence, the H₂Pc Q-bands are shifted to the red while the B-bands in the Soret's region are oppositely blue shifted.

In the singlet fluorescence spectra shown for H₂TBP and ZnTBP in Ar host at 5 K, the higher energy band at 654.2 nm corresponds to the 0-0 zero-phonon origin band. Its structure suggests the presence of several marked sites as also noticed from the absorption spectrum. Besides the rather intense electronic origin region, the most intense band which appears in the H₂TBP/Ar spectrum is that centered at 731.9 nm (13663 cm⁻¹), revealing, like in the case of H₂Pc, the existence of stimulated emission in a 4-level scheme involving a vibronic transition from the lowest electronic state to a vibrational level of the ground state.

As was noted in [7,8], the 1620 cm⁻¹ vibration of H₂TBP corresponds to the A_g stretching vibration of the CaCm bonds, *i.e.* to the vibration which is localized in the CaCmCa bridges in H₂TBP (Ca-carbon atom in the α-position of the pyrrole rings, C_m-carbon atom in the meso-position (CaCmCa bridges).

Upon increasing up the pump power intensity by a factor of about ten, from tens of μJ/pulse to hundreds of μJ/pulse, the emission band at about 732 nm gained enormously in intensity while the others remained unchanged or diminished slightly. Moreover, the linewidth of this emission band was reduced considerably while its intensity increased. The width of the band is approaching that of the exciting laser, decreasing from approximately 8 cm⁻¹ to 2 cm⁻¹, a value surely limited by the resolving power of the monochromator.

The results summarized here confirm that the phenomenon of stimulated emission firstly observed for phthalocyanines in cryogenic matrices under modest conditions of pulsed laser excitation is not an exception. With free-base H₂TBP, stimulated emission was observed in Ar and N₂ matrices, but not in Xe matrices. The vibronic transition involved is, , the

one involving a mode at about 1620 cm⁻¹, a particularly active mode corresponding to the stretching Ag-vibration of the CaCm bonds, like in the case of H₂Pc where the corresponding vibrational mode is at about 1550 cm⁻¹. From all results we have obtained on stimulated emission in cryogenic matrices, with H₂Pc, ZnPc as well as H₂TBP, we can reasonably predict that stimulated emission should also be observable for these molecules isolated in other solid materials that also produce narrow linewidths such as Shpol'skii matrices, like n-octane. Other possible interesting candidates could also be sol-gel or polymer hosts.

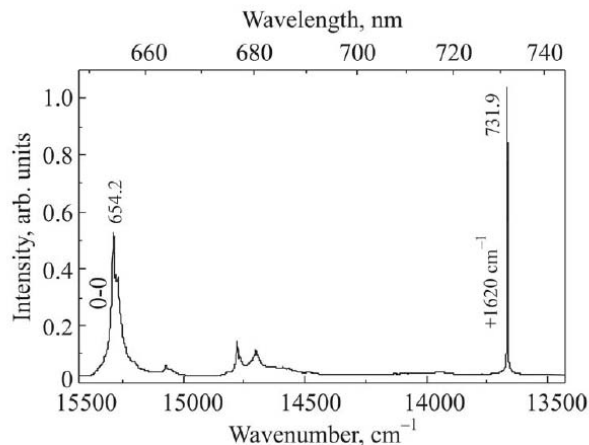


Figure 3. Typical schematic diagram for LIF experiment applied to jet cooled systems. Important is the tunable laser source constituted by a nanosecond excimer laser for pumping the dye laser eventually followed with a KDP non-linear crystal for frequency doubling [4].

LASER FLUORESCENCE IMAGING: BEYOND THE DIFFRACTION LIMIT

Nowadays, due to the discovery of an increasing number of highly fluorescent molecules for covering large field of applications, fluorescence is becoming a powerful tool also for imaging and especially, microscopy imaging particularly for biological studies. Owing to the recently discovered Green Fluorescent Protein which is fully biological compatible, the field is in constant expansion [9]. Interestingly, is the emergence of new super-high resolution methods to overcome the spatial resolution limit of conventional microscope due to light diffraction. Among all the ideas which are under development, we want to mention here only two of them which are known under their acronyms and briefly described below: STED and STORM.

(a) **STED: STimulated Emission Depletion** The original idea of STED, introduced in 1994 [10] is that the fluorescence focal spot can be extremely sharpened by selectively inhibiting the fluorescence on its outer part with a second laser beam at the appropriate wavelength [11]. As shown in the Figure 4, one laser has a Gaussian beam as in most of the conventional laser source, whereas the second laser, at a different wavelength has a donut shaped laser beam (Laguerre-Gauss laser mode).

The influence of the stimulated emission induced by the donut beam is roughly explained as follows: 1) After excitation

by the first laser, the molecule releases its energy normally in a photon of fluorescence. 2) However, it can be “forced” back to the ground state by stimulated emission. In a STED microscope, the excitation laser is pulsed. During the brief normal fluorescence lifetime (~1 ns), a STED pulse is sent. The donut shape of the STED beam around the excitation focal point and the nonlinearity of the STED effect increase the spatial resolution by reducing the effective PSF (Point Spread Function) of the fluorescent spot. While the STED beam itself is still diffraction-limited, increasing the intensity saturates the depletion efficiency distribution: even areas close to the minima of the STED beam profile are now sufficiently bright to virtually switch off all fluorescence. This restricts the remaining fluorescence to smaller and smaller volumes - ultimately only the spots of zero STED intensity remain fluorescent. The advantage of STED on the axial resolution is expressed by comparing the following equations:

$$\begin{aligned} \text{Confocal } \Delta d &= \frac{\lambda}{2n \sin \alpha} \\ \text{STED } \Delta d &= \frac{\lambda}{2n \sin \alpha \sqrt{1 + I/I_{sat}}} \end{aligned} \quad (2)$$

where I_{sat} means the laser STED intensity at saturation. In practice, spatial resolutions down to 20-30 nm, achieved with visible wavelengths, have been demonstrated by STED in a laser scanning microscope [13].

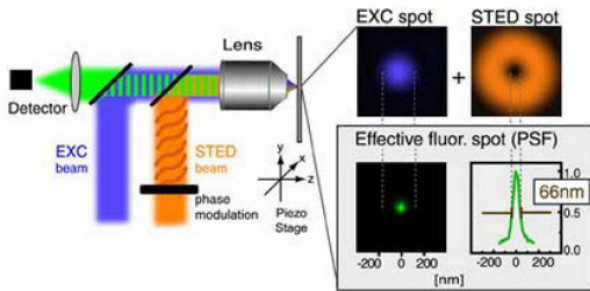


Figure 4: Scheme of a STED microscope. Two lasers are needed, one as usual with a Gaussian beam, a second one, the STED laser, with a donut shaped beam. Both lasers are pulsed [12].

(b) *STORM: STOchastic Optical Reconstruction Microscopy* In conventional fluorescence microscopy, a large number of fluorescent molecules are visible at a given time. Whenever two molecules are within the diffraction limited spot of one another, they cannot be distinguished as separate individuals. As a result, normal fluorescence images are blurred by diffraction and features smaller than the point spread function are lost.

In contrast, single fluorescent molecules can be localized with a much better precision, smaller than the diffraction limited resolution. Therefore, the principle of STORM microscopy is as follows: molecules of interest in the system to be imaged with very high spatial resolution are labeled with photo-switchable fluorophores which are initially in the non fluorescent state (Fig. 5-a). Using a pulsed laser source at a convenient wavelength, in a first activation cycle, a set of fluorophores is activated to the fluorescent state but such that

the diffraction-broadened spot of each fluorophore does not overlap. From the consideration that each spot originate from a unique activated fluorophore, the fluorescent probe is then assumed to be in the centre of the spot, marked with a black cross ((Fig. 5-b). In a subsequent activation cycle, a different set of fluorophores is activated and their positions are determined as before (Fig. 5-c). Finally, after a sufficient number of cycles, an image is constructed by plotting the red dots corresponding to the measured positions of the fluorophores (Fig. 5-d). The resolution of this image is then not limited by diffraction, but by the precision of each fluorophore localization and by the number of fluorophore positions obtained.

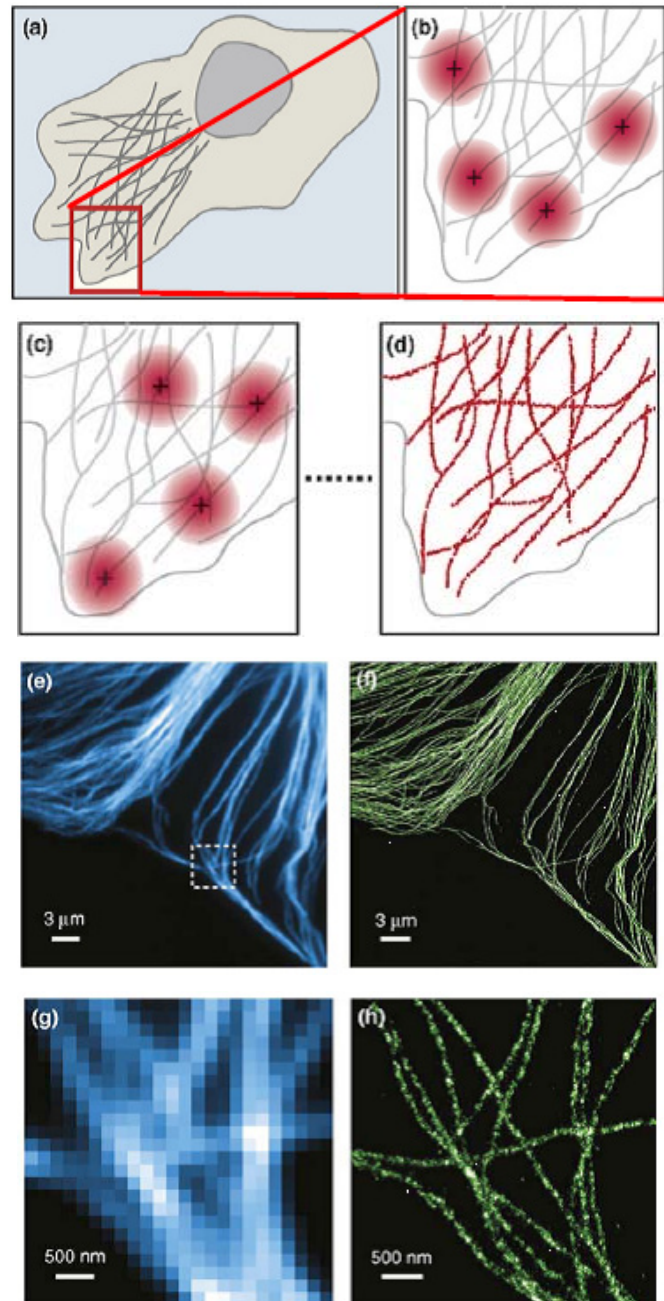


Figure 6: a-d) Principle of STORM and the reconstruction of a super-high spatially resolved image. e-h) Comparison of conventional immunofluorescence images of microtubules in a BS-C-1 mammalian cell (e and g) and STORM images (f and h) of the same areas.

An example of a result achieved using STORM is shown in

Figure 6. In the STORM images (Fig. 6-f and Fig 6-h), each localization is rendered as a Gaussian peak whose width corresponds to the theoretical localization precision. The areas shown in Fig 6-g and Fig 6-h are expanded views of the region defined by the dashed box in Fig. 6-e. The microtubules are immunolabeled with photo-switchable cyanine Cy3-Alexa 647 dye pairs. [14].

These powerful methods require the use of photoactive fluorescent probes. The choice of an appropriate probe depends on the knowledge of its photophysical properties and on the desired application. Probes with high photoactivation yields are desirable for controlling the number of active molecules. Particularly powerful probes are the genetically-encoded photoactive and photo-switchable proteins (PA-FPs) derived from the Green Fluorescent Protein (GFP) and other fluorescent proteins. Several criteria are advantageous for any photoactive probe: strong absorption coefficient at the activation and readout wavelengths, large fluorescence quantum yield in the active state, no or only a little tendency for self-aggregation, a small but finite quantum yield for photobleaching, also, for biological applications the probe emission should be separable from known intrinsic fluorescence and other sources of background. Notice that photoactivatable quantum dots would potentially be quite powerful, because of their resistance to photobleaching, as long as they could be targeted to the desired structure.

CONCLUSIONS

Through this short review, we wanted to emphasize on the increasing importance of Laser Induced Fluorescence, as well as in the field of high resolution spectroscopy or also, due the fluorescence revolution allowed after the discovery of new and fully biologically compatible new families of extremely active fluorescent probes, in new super-high resolved microscopy imaging methods.

ACKNOWLEDGEMENTS

C. Crépin, N. Shafizadeh, W. Chin from Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay, Bât. 210, CNRS and Université Paris-Sud 11, 91405 Orsay cedex, France, J.G. McCaffrey from

Department of Chemistry, National University of Ireland, Maynooth, Ireland and S.M. Arabei from Belarusian State Agrarian and Technical University, Minsk, Belarus are gratefully acknowledged.

- [1] U. Even, J. Magen, J. Jortner, J. Friedman, H. Levanon, *J. Chem. Phys.* **77**, 4374 (1982); U. Even, J. Magen, J. Jortner, J. Friedman, *J. Chem. Phys.* **77**, 4384 (1982); U. Even, J. Jortner, *J. Chem. Phys.* **77**, 4391 (1982).
- [2] A. Singh, W.Y. Huang, R. Egbujor, L.W. Johnson, *J. Phys. Chem. A* **105**, 5778 (2001).
- [3] S. Mazouffre, "Spectroscopie de fluorescence induite par diodes laser: Application au diagnostic des plasmas", in *Plasmas Froids : Systèmes d'analyse, Modélisation et Rayonnement*, Publications MRCT du CNRS (2009) p. 67 (in french)
- [4] From : <http://www.fi.tartu.ee/labs/ltl/images/lif.jpg>
- [5] N. Dozova, C. Murray, J.G. McCaffrey, N. Shafizadeh, C. Crépin, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **10**, 2167 (2008).
- [6] C. Crépin, N. Shafizadeh, W. Chin, J.-P. Galaup, J.G. McCaffrey, S.M. Arabei, *Low Temperature Physics* **36**, 451 (2010).
- [7] S.M. Arabei, K.N. Solovyov, Yu.I. Tatulchenkov, *Optics and Spectroscopy* **73**, 406 (1992).
- [8] S. F. Shkirman, L. L. Gladkov, V. K. Kostantinova and K. N. Solovyev, *Spectrosc. Lett.* **31**, 1749 (1998).
- [9] Fabienne Merola, Bernard Levy, Isabelle Demachy, and Helene Pasquier, "Photophysics and spectroscopy of fluorophores in the Green Fluorescent Protein family", in *Advanced Fluorescence Reporters in Chemistry and Biology I: Fundamentals and Molecular Design*, A.P. Demchenko (ed.), Springer Series on Fluorescence, Vol. 8 (2010) p. 347-384.
- [10] S.W. Hell, J. Wichmann, *Opt. Lett.* **19**, 780 (1994).
- [11] K.I. Willig, J. Keller, M. Bossi, S.W. Hell, *New J. Phys.* **8**, 106 (2006).
- [12] G.J. Simpson, *Nature* **440**, 879 (2006).
- [13] V. Westphal, S.W. Hell, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 143903 (2005).
- [14] M. Bates, B. Huang, G.T. Dempsey, X. Zhuang, *Science* **317**, 1749 (2007).

A CAPACITIVE BIOELECTRODE FOR RECORDING ELECTROPHYSIOLOGICAL SIGNALS*

UN BIOELECTRODO CAPACITIVO PARA MEDIR SEÑALES ELECTROFISIOLÓGICAS*

E. MORENO-GARCÍA^{a†}, S. MÚJICA-ASCENCIO^b, J. M DE LA ROSA-VÁZQUEZ^{b‡}, S. STOLIK-ISAKINA^b

a) Laboratorio de Instrumentación Electrónica, ESFM-IPN, Edificio No.9, U.P.A.L.M, México D.F. emoreo@esfm.ipn.mx[†]

b) Laboratorio de Láseres. SEPI-ESIME, IPN, Edificio No.5, U.P.A.L.M, México D.F. jos_delarosa@yahoo.com.mx[‡]

[†] corresponding author.

(Recibido 13/4/2012; Aceptado 10/4/2013)

In this paper we describe a gel-free sensor with on-board electrode design, which capacitive couples to the skin to detect the electrical activity in the body. The integrated sensor is manufactured on a standard printed circuit board within 2.2 cm diameter enclosure that can operate through fabric or other insulation. The electrode includes amplification (60 db gain) and passive bandpass filtering (0.5 to 100 Hz). Active shielding surrounding the sensor plate is used to reduce noise pickup. The input referred noise, measured over the electrode bandwidth is 4 μ Vrms at 0.2 mm sensor distance, and 16 μ Vrms at 1.2 mm distance through two cotton cloths. The bioelectrodes were coupled to the scalp through hair for EEG signals (with 80 db gain), and coupled to the chest through clothing for ECG signals. The recorded signals show well performance of the designed bioelectrode.

En este artículo describimos un sensor libre de gel diseñado con un electrodo en la placa, que se acopla capacitivamente a la piel para detectar la actividad eléctrica en el cuerpo. El sensor integrado fue manufacturado en un circuito impreso estándar dentro de un diámetro de 2.2 cm y puede operar a través del aislamiento de fábrica u otro. El electrodo incluye amplificación (ganancia de 60 db) y un filtrado pasa-banda pasivo (0.5 a 100 Hz). Un escudo activo rodea el sensor para reducir los efectos de los picos del ruido. El ruido a la entrada medido en el ancho de banda del electrodo es 4 μ Vrms a una distancia de 0.2 mm del sensor y 16 μ Vrms a 1.2 mm a través de dos capas de algodón. Los bioelectrodos se acoplaron al cuero cabelludo a través del cabello para obtener las señales de EEG (con 80 db de ganancia) y al pecho a través de la ropa para obtener las señales de ECG. Las señales grabadas muestran bien el rendimiento del bioelectrodo diseñado.

PACS: Skin effect, 72.30.+q, Potential models, 12.39.Pn, biopower systems, 88.20.M-, measurement of Impedance, *43.58.Bh, electrical Impedance, 84.37.+q, Noise in biological complexity, 87.18.Tt, in electrical circuits, 07.50.Hp

INTRODUCTION

The time-varying potentials on the surface of the human body result from the summation of many thousand individual sources underlying the skin. These sources are volume sources, which produce ion currents and electric fields through volumetric conductors. The recording of these electrical signals on the body's surface like ECG, EEG, EOG and EMG, among others, are an important tool for research and clinical purposes, they provide useful information regarding the physiological state of a subject. All of these biopotentials are microvolt level to millivolt amplitude on body surface, and they vary relatively slowly with signal bandwidths from 0.01 to 100 Hz and up to 4 kHz for EMG signals. Amplification of these potentials is not difficult but their detection from tissue or skin is not a straightforward processes. The placement of electrodes on the skin often creates problems such as baseline drifts, motion artifacts, and interference originating from power wiring and radiofrequency sources.

For detecting bioelectric signals from the body surface the

* Artículos presentados en el VII Taller internacional TECNOLÁSER y III Reunión de Óptica, Vida y Patrimonio (La Habana, abril de 2012)

standard wet Ag/AgCl electrode is still almost universally used. This electrode requires real charge current contact to the surface of the body by an electrolytic gel. The gel is used as an electrical transducer to convert the ionic current flow in the surface of the skin, into an electron flow which can then be detected by an electronic amplifier. For long recording periods the gel causes skin irritation and discomfort, and it tends to dry out which limits the recording time. Besides, the application area has to be properly cleaned, and sometimes also shaved. Non-contact capacitive electrodes do not require an ohmic connection to the body. Capacitive sensing relies on capacitive coupling, involving the skin and a metal sensor with a thin dielectric film on the contact surface. For body sensor applications, this offers numerous advantages since non-contact electrodes require zero preparation, are insensitive to skin conditions and can be embedded within comfortable layers of fabric. Capacitive electrode technology permits a continuous monitoring of patients for long periods of time, leading to very wearable body sensor network, which can include a wireless data transmission for real patient monitoring [1-6].

When biopotentials are picked up through clothes, coupling

capacitances are of a few pF, increasing up to hundreds of pF when the dielectric film is directly placed over the skin. In order to ensure a low frequency response and to avoid signal attenuation, such capacitances call for ultra-high input impedance amplifiers $\geq 10^{15} \Omega$. When using insulating electrodes, a path for the amplifier's bias current must be provided because it cannot flow through the patient, as is the case when wet electrodes are used. The ultra-high input impedance node is susceptible to any stray interference and motion induced artifacts. The design of low-noise amplifiers for insulating electrodes consists in achieving low noise levels in front of source impedances of a few pF, preserving input impedances of $10^{15} \Omega$. In this paper we report the design and characterization of a low-noise capacitive electrode, as well as some measurements recorded of ECG, EOG, and EEG signals.

BIOELECTRODE DESIGN

Figure 1 shows a simple model of the bioelectrical potential on the skin, coupled to the input amplifier through a skin-sensor capacitance C_c . For ultra high input resistance amplifiers ($R_i \geq 10^{15} \Omega$), the input impedance Z_i is dominated by the input capacitance at low frequencies ($\omega R_i C_i \gg 1$), and the circuit has an essentially flat-band response given by $V_i = V_s C_c / (C_c + C_i)$. For a good coupling $C_c \gg C_i$, such that $V_i \approx V_s$, yielding a near ideal detection of the electric biopotential on the skin.

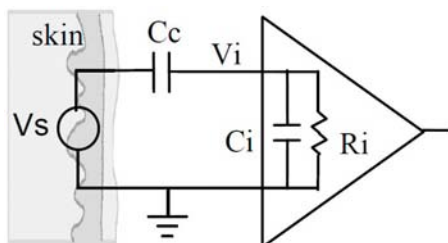


Figure 1. Skin-amplifier capacitive coupling interface.

Low signal frequencies (1-100 Hz) result in extremely high capacitive source impedance ($1/j\omega C_c$) on the same order as the input impedance of the amplifier ($\approx 1/j\omega C_i$). Therefore, even small variations in the coupling capacitance and distance can lead to large amounts of distortions due to signal attenuation, poor rejection to interferences and motion artifacts. To minimize these undesired distortions, the amplifier input capacitance must be as low as possible. A small amount of positive feedback can be applied to the input node, through a feedback capacitor, to neutralize the effect the amplifier input capacitance [3, 7, 8]. To operate the amplifier an input bias current must flow into the terminals at the amplifier input. However, in the circuit shown in Figure 1 there is no path to provide the input bias current, and so it charges up the capacitance C_c . The result is that the input has a steady voltage drift which can increase with time, saturating the amplifier output. To overcome the drift problem, some stabilization and feedback techniques have been developed, providing the ultra-high resistive path to ground at the input, as required for a properly bipotentials detection [2, 3, 9].

The designed electrode consists of two round standard printed circuit boards (PCBs) of 26 mm diameter, which are electrically connected by one cooper surface of each PCB, forming a shielding plane between the boards. A photograph of the assembled electrode is shown figure 2. Biopotentials on the skin are sensed through a 17 mm diameter cooper disc at the bottom of the lower PCB, covered with solder mask for electrical insulation. The sensor disc is shielded from external interference by an outer cooper ring, which is connected to the shielding plane above the sensing surface. The upper side of the second PCB contains the front end amplifier as well as gain amplifiers and passive components. As front end amplifier we use the electrometer grade operational amplifier LMP7721 (National Semiconductor) configured as unit-gain voltage follower. This device is designed with an input CMOS technology (patent pending) suitable for ultra-high impedance sensors. The LMP7721 has an ultra low input bias current of 3 fA at 25°C, a low input voltage noise of 6.5 nV/ $\sqrt{\text{Hz}}$, and an input current noise of 0.01 pA/ $\sqrt{\text{Hz}}$. In figure 2, an active shield is implemented by surrounding the critical input node by driving the sensor shield from the follower voltage output. Because it is actively driven to duplicate the input voltage, it avoids parasitic capacitance division of signal. Active shield guards high-impedance input from interference by other sources [3, 4, 8].

It was found experimentally that no external input biasing network is necessary with the LMP7721. The critical input node was left floating and the inputs consistently charge and stay within the rail-to-rail input range during use. The input can reliably self-bias purely through the device's internal ESD protection structure and other parasitic leakages. This achieves optimal performance since any bias network necessarily adds noise and degrades the input impedance. Figure 2 shows the bioelectrode schematic, where the lack of a bias network at sensor input, results in an undefined (although full usable) DC operating point. To remove this offset as well as low frequency noise drift, a passive RC high pass filter with a corner frequency of 0.5 Hz is used to center the signal around V_{ref} . To amplify the signal we use the micro power precision dual operational amplifier LTC 6078 (Linear Technology). Each operational in the package is configured as non-inverting amplifiers, approximately with a gain of 20 for the first stage and 50 for the second stage. A passive RC low pass filter with a corner frequency of 100 Hz is used at output of the first amplification stage, to obtain an overall electrode bandwidth of 0.5 – 100 Hz with 1000 gain.

CHARACTERIZATION

To characterize the performance of the sensor at various distances and dielectric mediums, a frequency sweep was applied to a cooper disc from a precision function generator (Fluke PM5139). This source electrode was coupled to the sensor through the smallest distance that of the solder mask, which is estimated to be 0.2 mm. Larger distances between the source electrode and the sensor plate, are formed with spacers

made of acrylic plastic and cotton fabric. The output voltages of the first amplification stage (gain of 20) were recorded with a digital oscilloscope (Tektronix TDS 2022B), and the signals measured were processed with a LabVIEW® program. Figure 3 shows the measured gains over the range of frequencies, for three different distances between the signal generator electrode and the sensor plate: 0.2 mm (solder mask), 0.6 mm (cotton fabric), and 1.2 mm (cotton fabric). As the distance is increased, the input coupling capacitance is reduced, as is the gain, and the input noise is increased.

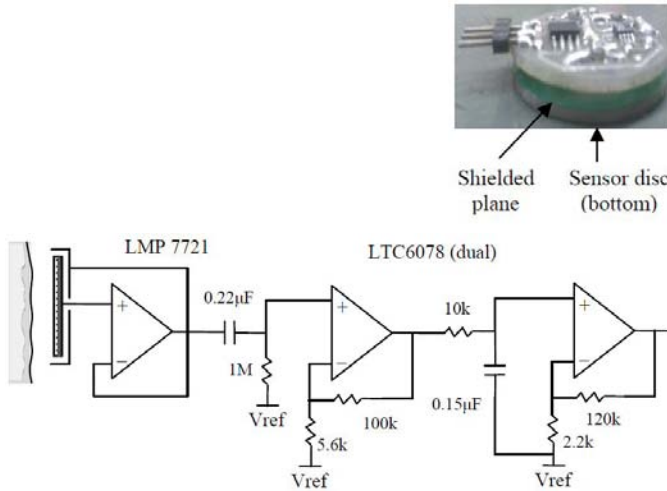


Figure 2. Schematic and photograph of the capacitive bioelectrode.

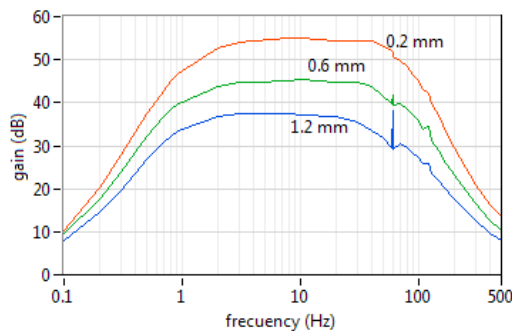


Figure 3. Gain versus frequency for three distances: 0.2 mm (solder mask), 0.6 mm and 1.6 mm (cotton).

Noise levels were measured by removing the signal generator and connecting the source electrode to the reference voltage of the circuit. The input referred noise is computed by taking the total output noise spectrum and dividing by the previously found mid-band (10 Hz) gain at the same separation distance. The calculated referred to input voltage noise of the amplifier in the frequency band is about 4 μ Vrms for 0.2 mm and 16 μ Vrms for 1.2 mm (cotton). The best estimated SNR is approximately of 72 at 0.2 mm (solder mask). For cotton the SNRs are approximately 35 at 0.6 mm, 17 at 1.2 mm, 4 at 1.8 mm, and degrades significantly for further sensing distances.

PHYSIOLOGICAL RECORDINGS

When electrodes are placed on the body, common mode

voltage (V_{cm}) results between the average potential of the body to the amplifier reference point. An effective way to reduce V_{cm} is by means of a common mode negative feedback, known as driven right leg circuit (DRL) [9]. We assembled a DRL circuit with the dual operational amplifier LTC6078 (Linear Technology) with -40 dB gain. This gain attenuates the V_{cm} by approximately 0.01.

For ECG experiments two electrodes were pressed against a subject's chest using an adhesive band. One was located above the heart while the second was placed over the opposing ribcage. The differential voltage between the two electrodes is recorded. When the recording is made over two cotton shirts (1.2 mm), some 60 Hz line noise is introduced as a result of capacitive mismatch due to the larger separation distance and corresponding smaller coupling capacitance, but the a signal caused by the beating heart is clearly visible, as figure 4 shows.

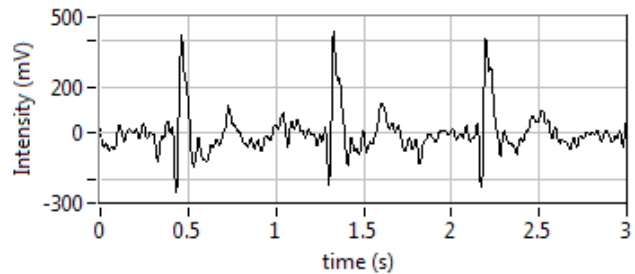


Figure 4. ECG recording taken over a subject's chest with the electrode placed through two cotton shirts.

For EOG experiments two electrodes were manually placed on the surface of the skin, each one beside of each eye (points L-R in the 4/5 system). Figure 5 shows difference voltage signal between the two electrodes resulting from left and right eye movements. Similar results were obtained placing the electrodes in points U-D (up and down of each eye) for up and down eye movements.

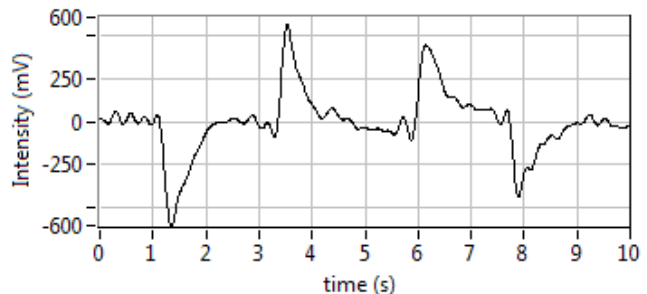


Figure 5. EOG signal recorded with electrodes placed over points L-R in the 4/5 system, showing deflections resulting from left and right slow eye movements.

EEG experiments were performed with two electrodes (overall gain of 5000) pressed against a subject's head using a headband. They were placed through hair approximately in the 'P3' and 'O1' positions referring to the international standard 10-20 system. The power spectral densities of the data recorded with open and close eyes are shown in Figure 6. Increased power in the alpha band of frequencies around 10 Hz can clearly be observed when the eyes are closed, which disappears when the eyes are opened, commonly observed in EEG experiments [4, 5, 8].

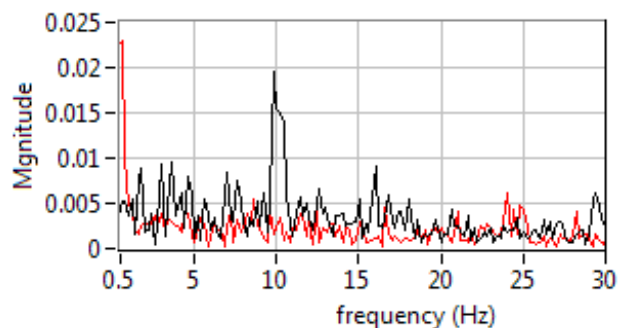


Figura 6. Spectra of EEG signals showing an alpha band with open eyes (black trace), which is not present when eyes are closed (red trace).

CONCLUSION

We have presented a non-invasive capacitive electrode for biopotentials sensing over body's surface. Biopotentials are capacitive coupled to a cooper disc sensor made on standard PCB, which integrates an ultra-high input impedance front-end, based on the latest CMOS technology operational amplifier LMP7721. The high input impedance level (1015Ω parallel 0.2 pF) means that the sources of body electrical signals are not loaded down by the coupling capacitance. The signals attenuation is less than 2% for 10 pF coupling capacitance. The electrode design includes two amplification stages with 60 dB overall gain, and two passive filter with 0.5 – 100 Hz bandwidth. In non-contact sensing the effect of capacitive gain errors due to variable strength coupling, introduces errors in the detected signals and increases input noise. In our experiments we found problems to sense EEG signal through the hair, due the inherent sensitivity to motion/friction artifacts. Future work involving active bootstrapping is expected to mitigate these effects The signals recorded show a well performance of the bioelectrode designed.

- [1] Yu Mike Chi, Tzyy-Ping Jung and Pert Cauwenberghs, *IEEE Reviews in Biomedical Engineering* **3**, 106 (2010).
- [2] C. J. Harland, T. D. Clark, and R. J. Prance, *Measurement Science and Technology* **2**, 163 (2002).
- [3] E. Spinelli and M. Haberman, *Physiol. Meas.* **31**, 183 (2010).
- [4] T.J. Sullivan, S.R. Deiss, and Gert Cauwenberghs, in *Biomedical Circuits and Systems Conference (BIOCAS)*, (IEEE, 2007) pp. 154–157.
- [5] Yu M. Chi, Stephen R. Deiss and Gert Cauwenberghs, *Non-contact Low Power EEG/ECG Electrode for High Density Wearable Biopotential Sensor Networks*, 2009 Body Sensor Networks.
- [6] P. Park, P.H. Chou, Y. Bai, R. Matthews, and A. Hibbs. An ultrawearable, wireless, low power ECG monitoring system. *Proc. IEEE International Conference on Complex Medical Engineering*, pages 241–244, Nov 2006.
- [7] Yu M. Chi and Gert Cauwenberghs, *Micropower Non-contact EEG Electrode with Active Common-Mode Noise Suppression and Input Capacitance Cancellation*, 31st Annual Int. Conf. of the IEEE EMBS, 4218-21, 2009.
- [8] T.D. Clark, R.J. Prance and C.J. Harland, *Electrodynamic Sensor and Applications Thereof*, International Application Published under the Patent Cooperation Treaty, Publication No WO 03/048789 A2, 12.06.2003.
- [9] A.C.Metting van Rijn, A.Peper and C.A.Grimbergen, *Med. & Biol. Eng. & Comput* **28**, 389 (1990).

DESARROLLO DE UN ESPECTRÓMETRO DE DIFRACCIÓN Y SU PROGRAMA DE CONTROL UTILIZANDO ELEMENTOS COMERCIALES DE BAJO COSTO*

DEVELOPMENT OF A DIFFRACTION SPECTROMETER AND ITS CONTROL PROGRAM USING COMMERCIAL, LOW-COST ELEMENTS*

O. ORMACHEA, O. URQUIDI[†] y J. CISNEROS

Centro de Investigaciones Ópticas (CIO), Universidad Privada Boliviana. o.urkidi@gmail.com[†]

[†] autor para la correspondencia.

(Recibido 13/4/2012; Aceptado 18/4/2013)

Se desarrolló un espectrómetro de difracción con elementos comerciales de bajo costo. Se diseñó con la configuración de un espectrómetro con rejilla de difracción por transmisión y entrada de luz regulable. Se construyó con elementos comerciales y de descarte como una rejilla de difracción holográfica, lente colimadora y objetivo de proyector digital. Para la detección se usó el sensor CMOS de una cámara web comercial. Se desarrolló un programa de control en MATLAB para la obtención y procesamiento de los espectros con el equipo. Calibrando la longitud de onda de forma no lineal se corrigieron los defectos ópticos. Se incrementó en 14 veces el SNR del espectro final procesando los datos. El equipo presentó una resolución efectiva de 1.4 nm y una precisión de ± 0.28 nm en las pruebas finales, demostrando ser funcional con un costo 10 veces menor (en materiales) al precio comercial de un equipo similar (Ocean Optics USB4000).

A diffraction spectrometer was developed, based on low cost commercial elements. The spectrometer was designed with the configuration of a transmission diffraction grating spectrometer with adjustable entrance slit. It was built with commercial elements like a holographic grating, collimator lens and a digital projector lens. For detection, a webcam CMOS sensor was used. A MATLAB based program was developed for the equipment, allowing the acquisition and processing of spectra. The optical defects were corrected using a non linear wavelength calibration. The SNR of final spectrum was increased in 14 times by processing the data. The Spectrometer showed an effective resolution of 1.4 nm and a precision of ± 0.28 nm in final tests, showing to work properly with a cost 10 times lower (in materials) to the commercial price of a similar equipment (Ocean Optics USB4000).

PACS: Visible and ultraviolet spectrometers, 07.60.Rd, Image processing in optics, 42.30.-d, Holographic gratings, 42.40.Eq

INTRODUCCIÓN

El desarrollo tecnológico de los últimos años ha crecido de gran manera, reduciendo costos, y permitiendo un acceso más libre a tecnología de punta. Todo esto ha puesto al alcance de todos, tecnologías que pueden ser utilizadas como punto de partida para el desarrollo de sistemas de complejidad considerable.

En el área óptica, el desarrollo de sistemas de obtención de imágenes digitales con el uso de sensores CCD y CMOS en cámaras web y fotográficas, ha permitido la digitalización y computarización de sistemas con un costo muy bajo. Así otros sistemas óptico-electrónicos que incluyen una gran variedad de elementos ópticos, brindan una fuente de recursos para la construcción de otros sistemas. También los sistemas computacionales juegan un papel importante en la actualidad, siendo el punto de unión ente estos elementos tecnológicos y finalmente potenciando sus características.

* Artículos presentados en el VII Taller internacional TECNOLÁSER y III Reunión de Óptica, Vida y Patrimonio (La Habana, abril de 2012)

Uno de los sistemas ópticos de medición más importante es el espectrómetro. Al ser un sistema que permite la descomposición de la luz en sus diferentes longitudes de onda, es ampliamente utilizado en el análisis de fuentes luminosas en diferentes áreas profesionales y científicas. Dada la importancia de este elemento de medición, en el Centro de Investigaciones Ópticas de la Universidad Privada Boliviana, se inició el desarrollo de este equipo aplicando tecnologías comerciales y de bajo costo.

En el presente trabajo se presenta el desarrollo y construcción de un espectrómetro de difracción en el espectro visible, utilizando como base de funcionamiento, elementos comerciales de bajo costo y de fácil obtención como el sensor CMOS de una cámara web, una rejilla de difracción holográfica de bajo costo y lentes obtenidas de proyectores digitales en desuso. Todo esto fue combinado con un programa computacional capaz de controlar el espectrómetro y obtener los espectros en vivo, procesarlos y guardarlos para su posterior análisis.

La importancia de este tipo de desarrollo científico radica en el desarrollo tecnológico propio a un costo bajo, incluyendo elementos comerciales de alta tecnología en sistemas desarrollados netamente en Bolivia. También, es importante destacar que el desarrollo de espectrómetros de bajo costo abre una puerta hacia el desarrollo de otros sistemas de mayor complejidad dentro de nuestro país.

SISTEMA ÓPTICO Y MECÁNICO DEL ESPECTRÓMETRO

Configuración del espectrómetro Desde el desarrollo de los primeros espectrómetros, su configuración ha sido compuesta por una rendija de entrada, un lente colimador, un elemento dispersor y un telescopio. Para fines fotográficos, el ocular del telescopio era reemplazado por una emulsión fotográfica [1]. En la actualidad se reemplaza la emulsión con un sensor CCD o CMOS para obtener una imagen digitalizada del espectro.

Las permitividades y las pérdidas dieléctricas fueron medidas dinámicamente desde 77 hasta 500 K a razón de 1.5 K por minuto con un medidor de precisión LCR HP4284A en el rango de frecuencias de 100 Hz a 1 MHz. Las mediciones se llevaron a cabo durante el calentamiento en el vacío mediante un Criostato Janis VPF 700 acoplado a un controlador de temperatura Lakeshore 331.

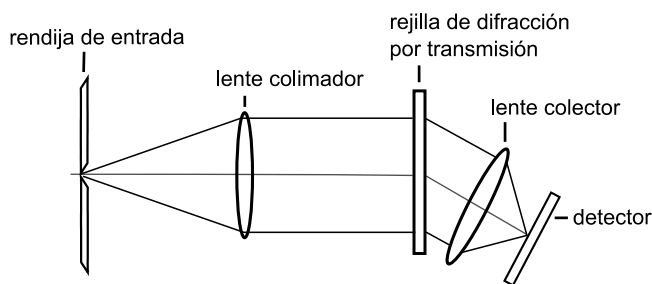


Figura 1. Configuración de un espectrómetro basado en una rejilla de difracción por transmisión. [1]

Selección del objetivo colector A diferencia de la lente de colimación cuya función es la de formar un haz paralelo, la lente de recolección de luz se encarga de formar la imagen del espectro en el detector, la combinación de esta lente y el detector se asemeja a la configuración de una cámara. Toda lente presenta aberraciones, como la aberración esférica, coma, astigmatismo, distorsión y aberración cromática [2]. Estas aberraciones distorsionan la imagen formada por la lente y no son deseables en la formación de imágenes.

Para obtener imágenes de campos de visión estrechos y disminuir satisfactoriamente las aberraciones fuera de eje (coma, astigmatismo y distorsión) y las aberraciones esféricas, usualmente solo es necesario utilizar una lente plano-convexa, sin embargo la aberración cromática seguirá existiendo. Para amplios campos de visión las aberraciones aumentan, y al ser la situación más crítica se suelen usar por lo menos dos lentes combinadas para corregir estas aberraciones, incluyendo la aberración cromática, siendo la más simple la lente doble

acromática. Esta última combinación de lentes es la base de la construcción de los objetivos fotográficos utilizados para la formación de imágenes libres de aberraciones y que normalmente contienen varias lentes que contrarrestan unas con otras las diferentes aberraciones [2].

En el caso del espectrómetro fue necesario encontrar un objetivo colector capaz de formar imágenes de un amplio campo de visión con una baja presencia de aberraciones fuera de eje, aberración esférica y cromática, siendo un objetivo fotográfico el más adecuado.

Los objetivos de proyección utilizados en proyectores digitales modernos tienen casi el mismo grado de corrección de aberraciones que los objetivos fotográficos, ya que deben proyectar imágenes claras y libres de aberraciones [3]. De manera experimental se encontró que un objetivo de proyector digital marca Epson con aproximadamente 30 mm de distancia focal y sin mecanismo de zoom cubría todo el espectro visible y sin aberraciones pronunciadas, siendo ideal para el espectrómetro.

Diseño del sistema óptico El diseño del sistema óptico se basó en elementos ópticos disponibles, fácilmente encontrados en proyectores y otros dispositivos de descarte. Se diseñó el espectrómetro utilizando la configuración descrita anteriormente con una rejilla de difracción por transmisión.

Se decidió utilizar una rejilla de difracción por transmisión por tener un costo muy bajo respecto a otro tipo de rejillas de difracción. Para este espectrómetro se utilizó una rejilla de difracción de 500 líneas/mm.

Como lente de colimación se usó una lente plano-convexa de 50 mm de diámetro y 96 mm de distancia focal. Para el elemento encargado de formar la imagen en el sensor CMOS se utilizó el objetivo de un proyector digital Epson de aproximadamente 30 mm de distancia focal.

Como detector se usó el sensor CMOS de una cámara web de 1280 x 960 píxeles. Se eligió una cámara web capaz de un control manual limitado para poder fijar los parámetros de obtención de la imagen y hacer repetible el proceso de medición.

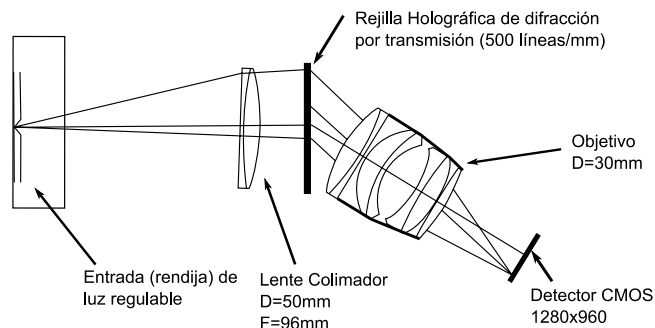


Figura 2. Diseño del sistema óptico del espectrómetro con elementos de fácil obtención.

Entrada de luz ajustable. Para la entrada de luz regulable se diseñó un sistema mecánico basado en dos cuchillas para afeitar y elementos

comerciales de sujeción como pernos y perfiles de aluminio. La función del sistema es aumentar o disminuir el ancho de la rendija con cuatro tornillos, dos a cada lado, con el objetivo de variar la cantidad de luz que entra al espectrómetro y la resolución.

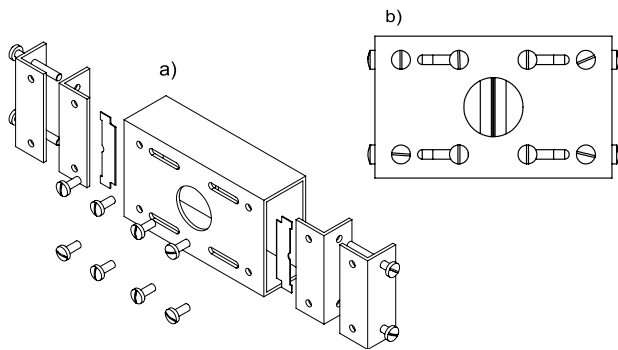


Figura 3. Diseño mecánico del sistema de entrada de luz ajustable utilizando perfiles de aluminio, resortes, pernos y un par de cuchillas de afeitar para generar la rendija. a) Sistema sin ensamblar b) Sistema ensamblado.



Figura 4. Sistema de entrada de luz (rendija) ajustable construido.

Montaje final del espectrómetro Tanto la lente de colimación como la rejilla de difracción se montaron en perfiles de aluminio. El objetivo se montó en el elemento de sujeción original del proyector, el cual se cortó y acomodó para permitir el montaje del sensor CMOS de la cámara web junto con sus elementos electrónicos. El objetivo y el sensor se montaron juntos a modo de cámara para permitir un mejor ajuste del ángulo respecto al eje óptico del sistema.

Luego de realizar el proceso de alineación de los elementos y de comprobar su funcionamiento, se aseguró cada pieza a un tablero de aglomerado de madera y se cubrió el sistema con una caja para evitar la perturbación de fuentes de luz externas.

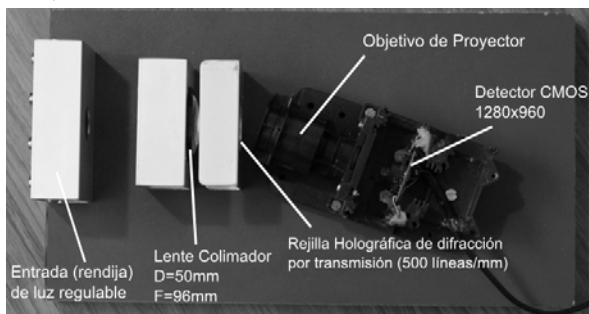


Figura 5. Montaje final del espectrómetro.



Figura 6. Espectrómetro terminado y cubierto.

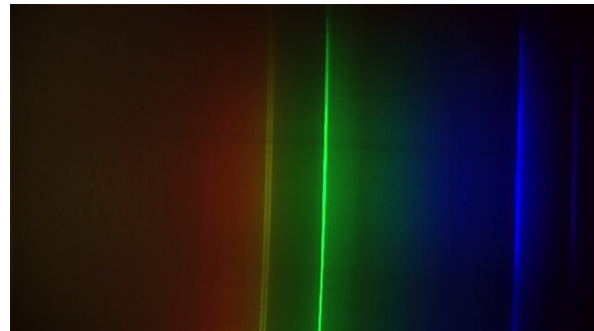


Figura 7. Imagen del espectro de una lámpara de sodio obtenida con el espectrómetro terminado.

Luego del montaje final se procedió al ajuste del foco y a la comprobación del funcionamiento del espectrómetro utilizando una lámpara de mercurio como fuente luminosa como se muestra en la Figura 7.

PROGRAMA DE CONTROL

El programa de control fue desarrollado enteramente en MATLAB, tanto para adquirir los datos del sensor CMOS como para procesarlos posteriormente. El programa fue desarrollado con la capacidad de mostrar en tiempo real el espectro de la luz analizada, además de poder cambiar el tiempo de exposición porcentual de la cámara. El programa también permite guardar los datos de los espectros en un archivo de texto, así como realizar un procesamiento de imagen para mejorar la calidad del espectro final. El programa, para poder mostrar correctamente la escala de longitud de onda, utiliza un archivo de calibración generado por otro programa especialmente diseñado para este propósito.

Ya que el sensor CMOS está compuesto por un mosaico de Bayer para producir imágenes a color, el programa convierte la imagen RGB en monocromática sumando los tres canales para formar uno solo. Luego extrae una fila de píxeles de la región de mayor calidad de imagen del sensor para graficar la intensidad plasmada en cada píxel en una escala de 0 a 255 (imagen de 8 bits). La gráfica de estas intensidades respecto a cada píxel relacionado con una longitud de onda (relación determinada con la calibración previa) representa la gráfica del espectro como se muestra en la Figura 8.

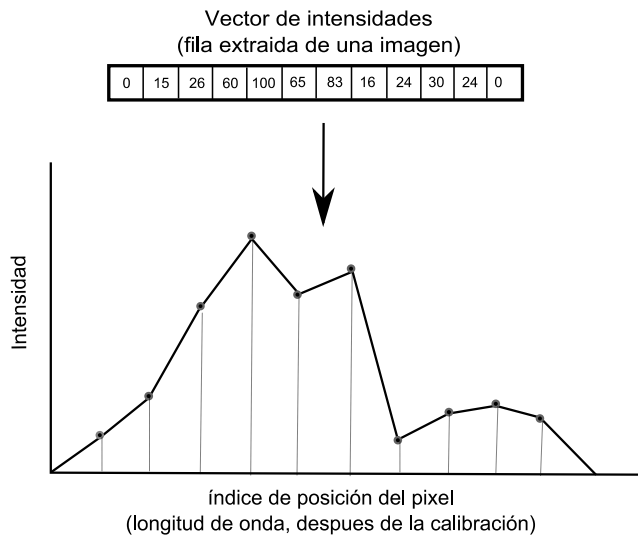


Figura 8. Espectro final generado en base a los valores de intensidad de un vector y a sus índices de posición. Los índices de posición se convierten en longitudes de onda después de la calibración.

CALIBRACIÓN DEL ESPECTRÓMETRO

La práctica siguiente [4] es la más utilizada para realizar la calibración de longitud de onda en un espectrómetro, que se basa en el ajuste de una ecuación a las posiciones de líneas espectrales conocidas. La forma más simple y utilizada de esta ecuación es un polinomio de la forma siguiente.

$$\lambda(n) = A + Bn + Cn^2 + Dn^3 + \dots \quad (1)$$

donde n es el índice de píxeles en el eje horizontal del sensor, λ es la longitud de onda en esa posición y A, B, C , etc., son los coeficientes a ser determinados por regresión.

Para la calibración se utilizaron 4 líneas del espectro de una lámpara de mercurio, generando un polinomio de tercer orden en MATLAB. No se vio la necesidad de utilizar un polinomio de un grado mayor ya que una comparación de longitudes de onda realizada por Brownrigg [4] en el rango 340-692 nm, entre el método exacto (ecuación de la rejilla de difracción) y la expansión de series de Lindrum y Nickel [5] mostró que el aumento de orden más allá del tercer orden no afecta en gran medida la precisión en longitud de onda.

Para la calibración se utilizaron las líneas espectrales de una lámpara de mercurio de 404.66, 434.75, 546.07 y 576.96 nm [4], las cuales están entre las más comúnmente usadas para calibración.

PROCESAMIENTO DE IMAGEN

Debido a la gran cantidad de ruido generado por el sensor CMOS utilizado, el programa también cuenta con la opción de realizar un procesamiento de imagen para mejorar la calidad del espectro final, que se puede expresar con la relación de señal versus ruido (SNR). Este procesamiento de información tiene como objetivo restarle a la información final los defectos

y errores causados por inestabilidades inherentes al dispositivo de adquisición de los datos (sensor CMOS). Estos errores y defectos se presentan en forma de ruido, el cual perjudica la calidad y claridad del espectro final. El ruido puede presentarse de forma permanente, siendo defectos físicos en el sensor los que lo generan, o de forma aleatoria como variaciones pasajeras en la medición de cada píxel del sensor. Para este trabajo se utilizaron algunos métodos conocidos [6] para reducir de manera considerable los efectos de ambos tipos de ruido.

Substracción de ruido estacionario Este tipo de ruido está presente en todas las imágenes, incluso al cambiar de escena. Para eliminar este ruido se obtiene una imagen sin escena, esto significa que se debe tomar una imagen cubriendo la entrada de luz del espectrómetro y así solo obtener en la imagen el ruido producido por los defectos del sensor (darkframe) para luego restarla a la imagen del espectro como se expresa en la siguiente expresión.

$$Q_i[m, n] = P_i[m, n] - D[m, n] \quad (2)$$

donde Q es la imagen resultante sin ruido estacionario, P es la imagen que lleva la información del espectro y D es la imagen que solo contiene el ruido estacionario (darkframe).

Reducción de ruido transitorio El ruido aleatorio se presenta de manera aleatoria en las imágenes y tiene la misma probabilidad de aparecer en cada píxel de la imagen. Para reducir la presencia del ruido aleatorio en una imagen se realiza la suma de múltiples imágenes que contengan la misma información de escena, dando como resultado un aumento en el SNR de la imagen. Si bien una imagen está representada por una matriz, al ser este un método punto a punto de atenuación de ruido, este método también es aplicable a un vector.

$$R[n] = \sum_{i=1}^T Q_i[n] \quad (3)$$

Una buena forma de medir la presencia de ruido es la relación entre señal y ruido (SNR), la cual está definida por la relación entre la desviación estándar de la señal esperada y del ruido.

$$SNR = \frac{\sigma_s}{\sigma_e} \quad (4)$$

Realizando un análisis estadístico [6], el SNR después de la suma de múltiples imágenes se incrementa por un factor igual a la raíz cuadrada del número de imágenes sumadas T .

$$SNR_r = \sqrt{T} \frac{\sigma_s}{\sigma_e} \quad (5)$$

Para reducir la presencia de este ruido en la imagen del espectro se realizó una suma de múltiples filas adyacentes de la imagen conteniendo la misma información de escena (el espectro).

Se sumaron 200 vectores horizontales adyacentes verticalmente, correspondientes a la región vertical de mayor calidad en el espectro. Del resultado de la suma se obtuvo un vector con un factor de incremento de su SNR de 14 veces.

RESULTADOS

Precisión en longitud de onda Para la obtención de un rango de precisión del espectrómetro se midieron varias líneas de una lámpara de sodio y se compararon con los valores reales para obtener un error, que se promedió al final. Este error representa el intervalo de precisión del espectrómetro, que resultó ser ± 0.28 nm.

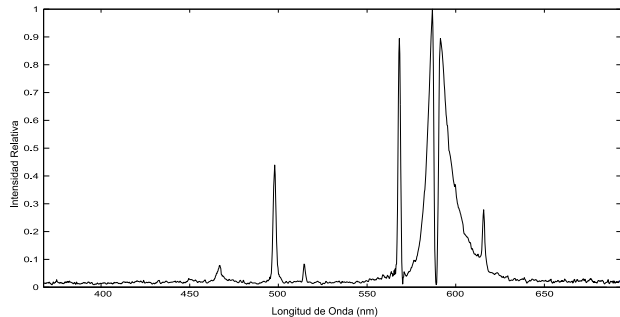


Figura 9. Espectro de una lámpara de sodio obtenido con el espectrómetro desarrollado

Línea espectral	λ real (nm)	λ medida (nm)	Error
Na I 466.85	466.85	467	0.15
Na I 497.85	497.32	497.9	0.58
Na I 514.88	514.88	514.5	0.38
Na I 568.26	568.26	568.2	0.06
Na I 616.07	616.07	615.8	0.27
Error promedio			0.288

Incremento de SNR por procesamiento de imágenes La Figura 10 muestra el espectro de una lámpara de mercurio obtenida de una sola fila de píxeles del sensor al 100% de exposición, sin ningún procesamiento de imagen para la disminución de ruido. La Figura 11 muestra el espectro de la misma lámpara con el procesamiento de imagen para la disminución de ruido, aumentando en 14 veces su SNR.

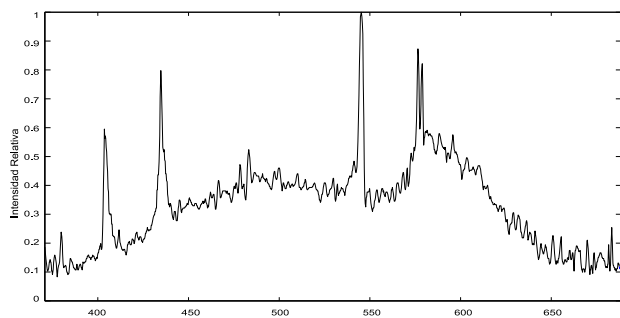


Figura 10. Espectro de una lámpara de mercurio sin procesamiento.

Resolución efectiva del espectrómetro Los espectrómetros no son perfectos y registran una línea espectral con un ancho finito. Esto se conoce como el “perfil instrumental de línea” y puede ser determinado por la caracterización del espectro de un láser o de una lámpara de baja presión de emisión Hg1/Ar1 con la rendija de entrada a su mínima apertura.

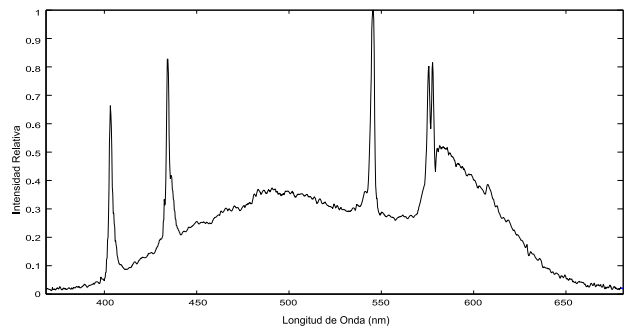


Figura 10. Espectro de una lámpara de mercurio luego del procesamiento para la reducción de ruido.

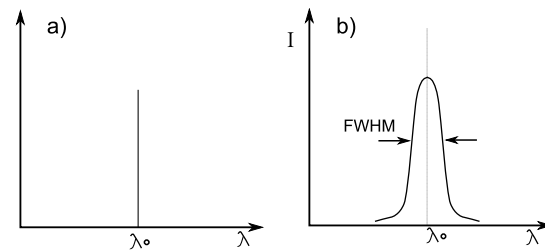


Figura 12. a) Espectro de una fuente monocromática obtenido por un espectrómetro ideal, b) Espectro de una fuente monocromática obtenido por un espectrómetro real. [8]

La resolución es la habilidad límite de un instrumento para separar dos líneas espectrales. El paso de banda (bandpass) es el ancho a la mitad del perfil de la línea espectral (FWHM) del espectro detectado (Figura 12). El mínimo paso de banda posible es la resolución y se determina cuando el FWHM de una línea monocromática de emisión no se reduce más, aun cuando la rendija continua siendo cerrada [8].

Se obtuvo el FWHM de la línea de emisión de 434.4 nm de una lámpara de mercurio, escogida arbitrariamente. El FWHM, siendo igual a la resolución fue de 1.4 nm. Esto se comprobó ya que el espectrómetro fue capaz de resolver la separación de aproximadamente 2 nm entre las líneas de 575.7 y 577.8 nm de la lámpara de mercurio.

CONCLUSIONES

Se consiguió desarrollar y construir un espectrómetro de difracción por transmisión en el rango 370-680 nm, con una resolución efectiva aproximada de 1.4 nm y una precisión de ± 0.28 nm, utilizando una rendija ajustable, una rejilla de difracción por transmisión, una lente colimadora y el objetivo de un proyector.

Se desarrolló exitosamente el programa de control basado en MATLAB para el control del espectrómetro, siendo de suma importancia para el potenciamiento de las capacidades del espectrómetro construido. Permitiendo realizar correcciones a los defectos ópticos del sistema por medio de una calibración no lineal de longitud de onda.

Se logró utilizar el sensor de una cámara CMOS como detector para la digitalización de los datos, con buenos resultados para fuentes luminosas estables en el tiempo. Con ayuda del

procesamiento de imagen se aumentó su SNR y así mejoraron sus prestaciones.

Los métodos de eliminación de ruido utilizados fueron de gran ayuda en el mejoramiento del SNR de los espectros, aumentando 14 veces el SNR de los espectros procesados. Después de la aplicación de este procesamiento se observó una mejora considerable en la calidad de los espectros finales.

El equipo desarrollado representa una herramienta de bajo costo para realizar la medición e identificación de fuentes luminosas, con una precisión y resolución comparable a la de espectrómetros comerciales y un costo 10 veces menor (en materiales) al precio comercial de un espectrómetro similar como el USB4000 de Ocean Optics.

PERSPECTIVAS

Con la modificación parcial del programa de control el espectrómetro puede ser utilizado para fines educativos, mostrando aparte de la gráfica del espectro, la imagen a colores detectada por la cámara. El bajo costo y la facilidad de construcción hacen de este equipo ideal para fines educativos.

Para que un espectrómetro se convierta en una verdadera herramienta de medición es necesario realizar una calibración en

intensidad. Sin embargo, por lo experimentado en el desarrollo de este trabajo, la cámara con sensor CMOS utilizada no tiene la misma respuesta espectral en las diferentes exposiciones. Además de presentarse el inconveniente de ser una cámara con matriz de Bayer y no monocromática. El siguiente paso en el mejoramiento de este equipo será la calibración y eliminación de defectos en respuesta a la intensidad.

[1] J. James, *Spectrograph Design Fundamentals*, (New York: Cambridge University Press, 2007).

[2] W. J. Smith, *Modern Optical Engineering*. (McGraw-Hill, 2008).

[3] D. Malacara and Z. Malacara, *Handbook of Optical Design*, (New York: Marcel Dekker, 2004).

[4] J. Thomas Brownrigg, **47**, 1007 (1993).

[5] M. Lindrum and B. Nickel, *Spectroscopy* **43**, 8 (1989).

[6] S. E. Reichenbach. (2011) *Pointwise Operations*. [Online]. <http://cse.unl.edu/~reich/CSCE472/Pointwise.pdf>

[7] Yu. Ralchenko, A. E. Kramida, J. Reader, and NIST ASD Team. (2011) National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD. [Online]. <http://physics.nist.gov/asd>.

[8] J. M. Lerner, *Cytometry* **69A**, 712 (2006).

MEDICIÓN REMOTA DE OZONO EN TUXTLA GUTIÉRREZ, CHIAPAS, MÉXICO, UTILIZANDO LA TÉCNICA DOAS*

OZONE REMOTE MEASUREMENT IN TUXTLA GUTIÉRREZ, CHIAPAS, MEXICO, USING THE DOAS TECHNIQUE*

C. GARCÍA-LARA^{a†}, H. NÁJERA AGUILAR^a, J. CAMAS-ANZUETO^b AND S. MENDOZA-VAZQUEZ^c

a) Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas, Facultad de Ingenierías, México. carlosmg110@gmail.com†

b) Instituto Tecnológico de Tuxtla Gutiérrez, México, jorgecamas@hotmail.com

c) Universidad Autónoma de Chiapas, Centro de Estudios en Física y Matemáticas Básicas y Aplicadas, México, smendoza@unach.mx

† autor para la correspondencia.

(Recibido 13/4/2012; Aceptado 26/4/2013)

Se presenta una breve descripción de un sistema de monitoreo remoto de contaminantes basado en espectroscopia por absorción óptica diferencial pasiva, la cual permite detectar trazas de contaminantes presentes en la atmósfera. Este sistema fue colocado en las instalaciones de ciudad universitaria de la UNICACH, monitoreando una extensión lineal de aproximadamente 2.9 km, se determinó la concentración de ozono presente en la zona de estudio, evaluando además la influencia de las condiciones climáticas con los resultados obtenidos, al final se realizó una comparación con un sistema de detección comercial utilizado por la SEMAVIH, dependencia del gobierno, observando una buena correlación entre ellos.

A brief description of a remote pollutants monitoring system based on passive differential optical absorption spectroscopy, which detects atmospheric trace gases is presented. This system was placed in the UNICACH campus facilities for monitoring a linear extension approximately 2.9 km. It was determined the concentration of ozone in the area of interest, also evaluating the influence of climatic conditions in the obtained results which finally were compared with a detection system used by the government dependence SEMAVIH, observing a good correlation between them.

PACS: Spectrometers visible and ultraviolet, 07.60.Rd, Optical absorption in atmosphere, 42.68.Ay, 92.60.Ta, Instruments for measurement of pollution, 07.88._y, Optical devices for remote sensing, 42.79.Qx

INTRODUCCIÓN

La contaminación del aire debido a actividades antropogénicas puede ocasionar serios problemas ambientales y de salud [1]. Las emisiones producidas por el tráfico diario de vehículos están entre las mayores fuentes antropogénicas de emisión de contaminantes a la atmósfera. Componentes volátiles y óxidos nitrosos (NO_x) son algunos de los componentes de estas emisiones, los cuales son parte importante en la formación de ozono. La capa de ozono, componente muy pequeña de la atmósfera, desempeña un papel importante en la físico-química de la atmósfera, esta envuelta en la atenuación directa de la radiación solar, especialmente en el rango de longitudes de onda del UV, además de estar involucrada en diferentes procesos de foto-disociación relacionados a la producción de oxígeno. Esta reacción de fotólisis desarrollada con radiaciones de longitud de onda cortas ($\lambda < 310 \text{ nm}$) es particularmente importante debido a la producción de radicales O, que interactúan con moléculas tales como H_2O , CH_4 , hidrocarburos y produce radicales OH que influyen en toda la química atmosférica. El ozono presenta absorción en toda la región espectral UV-Visible [2], desde la banda Hartley en el UV, pasando por las bandas Huggins y Chappuis en el UV

cercano y visible, hasta la banda Wulf en el infrarrojo cercano. Particularmente, en la banda Hartley (200-320 nm), diferentes laboratorios presentan acuerdos de alrededor de 1-2%, en donde el efecto de la temperatura es débil [3], llegándose a observar ningún efecto dependiente de la temperatura a 210 nm.

El entendimiento y mitigación de la contaminación del aire requiere la aplicación de elaborados modelos para volumen finito, los cuales son realizados con una resolución horizontal de aproximadamente 1.5 km para áreas urbanas [4]. Técnicas de medición remotas [5], como la de espectroscopia por absorción óptica diferencial (DOAS) [6], la cual se basa en la diferencia entre absorciones a dos diferentes longitudes de onda, transformada rápida de Fourier en el infrarrojo (FTIR) y espectroscopia por absorción de un diodo láser sintonizado (TDLAS), proveen directamente la concentración promedio de diferentes gases traza. Sin embargo, estas técnicas espectroscópicas tienen limitaciones intrínsecas, la técnica DOAS esta restringida a pocas especies que tienen relativamente estrechas, las bandas de transición altamente estructuradas. El requerimiento de compactación de sistemas FTIR usualmente implica una resolución espectral baja, lo cual limita su selectividad, además de distancias de absorción usualmente pequeñas, menores a 200 m, que pueden ocasionar

* Artículos presentados en el VII Taller internacional TECNOLÁSER y III Reunión de Óptica, Vida y Patrimonio (La Habana, abril de 2012)

una baja sensibilidad. Los sistemas TDLAS operan con una resolución espectral alta pero son apenas sintonizables [7].

No obstante, la técnica DOAS puede detectar y medir gases traza como ozono, óxidos de nitrógeno, dióxido de azufre, óxidos de halógeno y diferentes hidrocarburos. Puede utilizar fuentes continuas de luz natural (sol, luna, etc.) o artificial (láser). Debido a sus rasgos característicos de absorción es posible medir diferentes gases traza simultáneamente [8].

La propuesta de este trabajo es determinar la concentración de ozono presente en la ciudad de Tuxtla Gutiérrez, México, utilizando un arreglo DOAS con una longitud de camino óptico de 3 km aproximadamente.

METODOLOGÍA

La técnica utilizada fue del tipo DOAS pasivo utilizando como fuente de iluminación la luz solar. Utilizando un análisis DOAS al espectro obtenido se puede obtener la concentración del gas traza deseada a lo largo de un segmento de longitud conocida. En un arreglo típico un haz de luz blanca, emitida por un telescopio, viaja a través de la atmósfera hasta un reflector y es devuelta al telescopio [9]. Los patrones de absorción de la luz recibida permiten determinar la concentración de los gases traza a lo largo del recorrido de la luz. La absorción de esta radiación esta definida por la ley de Beer-Lambert

$$I = I_0 \exp(-L\sigma(\lambda)c) \quad (1)$$

donde $I_0(\lambda)$ es la intensidad de la luz sin la presencia de ningún contaminante, $I(\lambda)$ es la intensidad de la luz después de pasar a través de un medio, viajando una distancia L , c representa la concentración de las especies a ser medidas, $\sigma(\lambda)$ representa la sección transversal de la absorción a una longitud de onda λ . La concentración c , puede ser determinada a partir de la razón entre las intensidades de entrada y salida del medio a ser evaluado

$$c = \frac{\ln(I_0(\lambda)/I(\lambda))}{\sigma(\lambda)L} = \frac{D}{\sigma(\lambda)L} \quad (2)$$

donde D , es conocida como la densidad óptica de una capa de una especie dada [10].

Para el caso de un sistema DOAS pasivo con condiciones iniciales de absorción débil, resolución espectral baja y una fuente de luz estructurada, se tiene que la razón de intensidades esta dada por:

$$\ln\left(\frac{I^*(\lambda, L)}{I_0^*}\right) = \frac{\sum_j c_j L \ln\left[\frac{\int_{-\Delta\lambda}^{\Delta\lambda} I'_0(\lambda - \lambda', L) \exp(\sigma'_j(\lambda - \lambda')) H(\lambda') d\lambda'}{\int_{-\Delta\lambda}^{\Delta\lambda} I'_0(\lambda - \lambda', L) H(\lambda') d\lambda'}\right]}{D} \quad (3)$$

donde $H(\lambda)$, representa la función propia del instrumento de medición.

ARREGLO EXPERIMENTAL

Para la medición remota de contaminantes atmosféricos se utilizó un telescopio refractor acromático marca MEADE modelo ETX-80AT, el cual cuenta con un ocular, encargado de amplificar la imagen formada por el objetivo, además de un espectrofotómetro UV, marca BW TEK, modelo BRC112E con una resolución de 1 nm, el cual abarca las longitudes de onda específicas para el monitoreo de ozono, O_3 (150-450 nm). Otros parámetros necesarios de medir para el análisis de datos, debido a la relación que presentan con la formación, transporte y precipitación de contaminantes, son las condiciones climatológicas.

El estudio se realizó en la ciudad de Tuxtla Gutiérrez, localizada en la Depresión Central de Chiapas, la cual está compuesta por un valle, limitada al sur y norte por dos elevaciones orográficas, en una de estas se encuentra la UNICACH y sitio de instalación del sistema DOAS, el sitio de estudio se determinó debido a la afluencia de automóviles presentes en la zona centro tomando como referencia la pared de un edificio y considerando que la radiación reflejada por este, es mucho mayor que aquella debida a la dispersión de la luz solar, el edificio seleccionado está ubicado a una distancia del instrumento de 2.93 km, con latitud $16^{\circ}45'14.38''N$, longitud: $93^{\circ}7'3.87''O$. Una vez definido el sitio se procedió a tomar la medición con el arreglo experimental.

El telescopio permitió aislar la zona bajo análisis y recolectar la luz que va desde el área de estudio a la estación de monitoreo, posteriormente esta información fue enviada a través de fibra óptica hasta el espectrofotómetro, el cual proporcionó información del espectro de absorción del medio. Estas mediciones se realizaron para calcular la razón de intensidades, y a continuación se procedió a la determinación del ozono tomando como referencia su sección transversal, la cual, como ya se mencionó, es una característica propia de cada especie a estudiar. Además de lo anterior se realizaron mediciones de la luz proveniente del zenit, la cual se adoptó como haz de referencia, considerando que en la posición en que se encontraba el instrumento de medición no existía presencia de contaminantes.

RESULTADOS

La zona de monitoreo propuesta fue elegida debido a la posición privilegiada de la UNICACH que permite un campo de visibilidad amplio de esa zona, la importancia del tránsito vehicular que tiene y a la forma característica de la ciudad en la que puede haber una mayor formación de contaminantes en la zona, si se presentan ciertas condiciones atmosféricas, el estudio se realizó del 15 de febrero al 26 de marzo de 2010 en tres diferentes horarios 8 am, 12 pm y 3 pm, debido a que son horas en las que la hay un mayor índice de tráfico vehicular,

para el primer caso debido al inicio de actividades escolares y laborales, para el segundo (medio día) principalmente debido a actividad comercial que ahí se tiene y en el tercer horario debido al término de actividades laborales y escolares. En las figuras 1-3, se presenta la información obtenida del espectro de absorción medida en la trayectoria de análisis, expresada en unidades arbitrarias (u.a.), en función de los días de muestreo, además se pueden observar los márgenes de error correspondientes a diversos factores presentes en la zona de estudio.

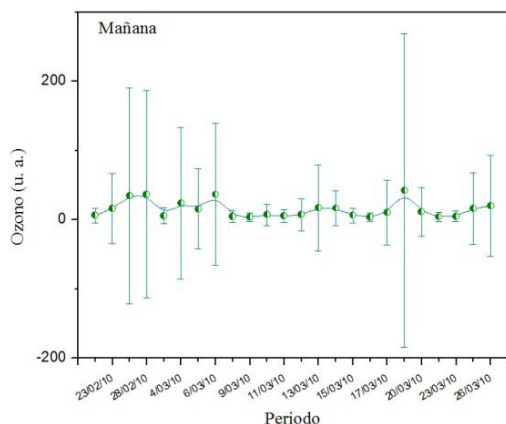


Figura 1. Espectro obtenido en la zona de estudio a las 8 A.M. durante el periodo de evaluación.

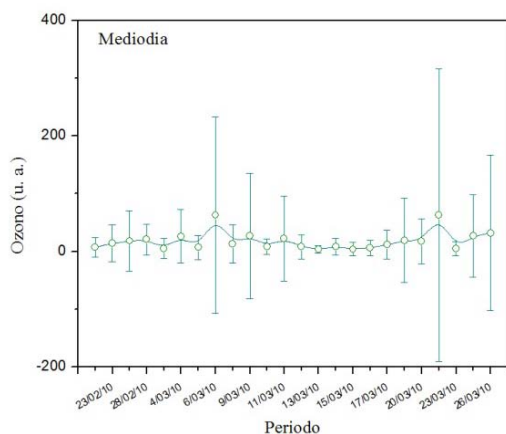


Figura 2. Espectro correspondiente a las 12 P.M. durante el periodo de evaluación.

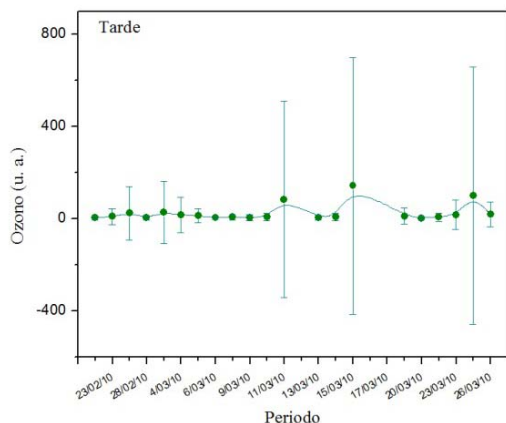


Figura 3. Espectro resultante del estudio realizado a las 3 P.M. durante el periodo de evaluación.

Considerando la ubicación del instrumento y del edificio relativo a la fuente de emisión, y tomando en cuenta que el edificio se encuentra dentro de la zona considerada como contaminada, se debe asumir una absorción adicional, debido a que la luz primero encuentra a los contaminantes antes que al edificio. Otros errores pueden deberse a gradientes horizontales de concentración de gases traza presentes en la trayectoria de estudio, así como diferencias en las condiciones de transferencia de radiación, debido por ejemplo a zonas de nubes. Normalmente, los errores resultantes son difíciles de cuantificar, pero una estimación general puede ser dada por la medición misma, esto es comparando las mediciones a diferentes distancias del edificio. En general puede ser considerado que los efectos de gradientes espaciales tienden a ser pequeños si la trayectoria de análisis es grande.

Valores negativos en las graficas indican que la concentración de O_3 entre el instrumento y el edificio es baja, además de que la cantidad de este contaminante alrededor del instrumento (durante el tiempo de medición del espectro de referencia) fue mucho mayor que sobre la trayectoria.

CONCLUSIONES

Se reportan mediciones de O_3 en la ciudad de Tuxtla Gutiérrez, México, aplicando el método DOAS pasivo. Conforme a los resultados obtenidos en las mediciones realizadas se encuentra que existe cierta aproximación entre las mediciones realizadas con técnicas convencionales (puntual) y el DOAS (trayectoria). Las diferencias son debidas a la naturaleza misma de la medición por trayectoria (DOAS) y el puntual (convencional). Los resultados del análisis de desempeño entre ambas tecnologías indican que la medición de la calidad del aire (para el O_3) a través del sistema DOAS es confiable, el cual a su vez, puede ser utilizado para realizar una medición continua de diferentes contaminantes que incluye además Hidrocarburos (Benceno, Tolueno, o,p,m, Xileno, Estireno y Fenol), aunque lo anterior dependerá de la resolución del espectrofotómetro. El uso del DOAS (medición por trayectoria abierta) para el monitoreo de la calidad del aire tiene grandes ventajas sobre la técnica de medición *in situ*. Esta permite hacer estudios de emisiones bajo el concepto de medición por fuente de área, así como evaluaciones de la calidad del aire de manera más integral por cuenca atmosférica con límites de detección tan bajos como 1 ppb. El uso del sistema DOAS permite realizar mediciones en diferentes bandas del espectro de luz para detectar interferencias en la detección de Ozono. Además los costos asociados a la operación y mantenimiento resultan moderados. Cabe señalar que esta técnica fue posible de implementar debido a las características propias de la ciudad, la cual presenta temporadas largas de cielo despejado, que es cuando se puede observar el fenómeno de foto-disociación de gases emitidos por los automotores, ya que en días nublados, con demasiada presencia de neblina o con probabilidades de lluvia se incrementa el error considerablemente, por lo que es necesario el desarrollo y caracterización de la configuración DOAS activa.

AGRADECIMIENTOS

A la SEMAVIHN por su apoyo en la realización de esta investigación, facilitando datos de contaminantes monitoreados en la zona de estudio.

-
- [1] J. Colls, *Air pollution*, 2nd Ed. (Clay's library of health and the environment, Spon. London, 2002), p. 592.
[2] J. Orphal, K. Chance, J. Quan. Spec. Rad. Trans. **82**, 491, (2003).
[3] J. Malicet, D. Daumont, J. Charbonnier, C. Parisse,

- A. Chakir and J. Brion, J. Atmos. Chem. **21**, 263, (1995)
[4] O. Couach, I. Balin, R. Jiménez, P. Ristori, S. Perego, F. Kirchner, V. Simeonov, B. Calpini, H. Van den Bergh, Atmos Chem and Phys **3**, 549 (2003).
[5] M. W. Sigrist, *Air monitoring by spectroscopy techniques*, 1st Ed. (John Wiley & Sons, New York, 1994), p. 531.
[6] J. Stutz, U. Platt, Appl. Optics **35**, 6041 (1996).
[7] R. Jiménez, M. Taslakov, V. Simeonov, B. Calpini, F. Jeanneret, D. Hofstetter, M. Beck, J. Faist, H. Van den Bergh, Appl. Phys. B **78**, 249 (2004).
[8] I. Pundt, Anal. Bioanal. Chem. **385**, 18 (2006)
[9] H. Axelsson, B. Galle, K. Gustavsson, P. Regnarsson, M. Rudin, Digest of Top Meet. Opt. Remote Sens. Atmos., Opt. Soc. Am. **4**, 641 (1990).
[10] U. Platt, J. Stutz, *Differential Optical Absorption Spectroscopy, Principles and Applications*, 1st Ed. (Springer-Verlag, Berlin, 2008), p. 597

DUODÉCIMO GRADO EN LA UNIVERSIDAD DE LA HABANA: ¿PALIATIVO, O ESTRATEGIA DEFINITIVA?

TWELFTH DEGREE AT THE UNIVERSITY OF HAVANA:
PALLIATIVE, OR FINAL STRATEGY?

R. FUNDORA-ARENCEBIA^{a†}, R. M. CALDERÓN-ARIOSAS^b

a) Departamento de Física Aplicada, Facultad de Física, Universidad de La Habana, La Habana 10400. rfundora@fisica.uh.cu[†]

b) CEPES, Universidad de La Habana, La Habana 10400, Cuba.

[†] autor para la correspondencia.

Desde el curso 2009-2010 se aplica una experiencia con los estudiantes de onceno grado interesados en cursar carreras de Matemática, Física, Química y Ciencias Biológicas, como parte de los esfuerzos que se realizan para elevar el nivel de entrada exigido por la enseñanza superior y mejorar los índices de acceso y permanencia en estas carreras. Estos estudiantes son seleccionados de acuerdo a los resultados obtenidos en los llamados “exámenes de requisitos adicionales” establecidos por cada facultad universitaria, para cursar el duodécimo grado en la universidad bajo la dirección de profesores universitarios. En este artículo se explican algunas de las acciones realizadas en la enseñanza de la Física con estos estudiantes en el caso de la Universidad de La Habana, dirigidas a garantizar una asimilación más eficiente de los conceptos, leyes y teorías de la asignatura, una mayor independencia en su actuación, un desarrollo superior de sus habilidades prácticas e intelectuales y la elevación de su interés por la Física.

Since the academic year 2009-2010, a new plan has been applied to 11th grade students who are interested in pursuing higher level education in Mathematics, Physics, Chemistry and Biological Sciences, as an effort to increase the knowledge demanded by the university level, and to improve the indices of access and permanence in the careers mentioned above. Based on their performance in the “additional requisites” exams established by the higher education institutions, these students are selected to take the 12th grade at the universities, under the guidance of university staff. In this paper we explain some of the actions taken on these students at the University of Havana in order to improve their learning of the concepts, laws and theories of Physics, to increase their independence, to develop their practical and intellectual abilities, and to raise their interest in Physics.

PACS: Careers in science, 01.85.+f; Education, 01.40.-d; Science and government (funding, politics, etc.), 01.78.+p.

INTRODUCCIÓN

La impartición del 12 grado en los centros de educación superior para estudiantes con interés en las carreras de ciencias exactas y naturales comienza a partir del curso 2009-2010 en tres universidades: la Universidad de Oriente (UO), la Universidad Central de Las Villas (UCLV) y la Universidad de La Habana (UH). La iniciativa se ha ido extendiendo a otros centros, como el Instituto Superior de Ciencias Agropecuarias de La Habana (ISCAH) y el Instituto Superior Pedagógico Enrique José Varona (ISPEJV) para estudiantes interesados en cursar carreras agropecuarias y pedagógicas, respectivamente. En este artículo nos concentraremos en el caso del proyecto en la Universidad de La Habana (12UH).

Para concebir el proyecto 12UH, se comenzó realizando una valoración crítica del programa y de los libros de texto establecidos por el Ministerio de Educación (MINED) para la enseñanza de esta asignatura en el grado. Se aplicó una encuesta a profesores de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana (FF) para conocer las regularidades en el

aprendizaje de los estudiantes de las diferentes especialidades al llegar a las aulas universitarias, y se realizó un diagnóstico inicial a los estudiantes donde se evaluaron los contenidos básicos recibidos en los grados anteriores de preuniversitario (cinemática, dinámica, gravitación, electrostática, movimiento de partículas cargadas en campos eléctricos y magnéticos uniformes y leyes de conservación de la energía y cantidad de movimiento). Sobre esa base se realizaron las modificaciones necesarias tanto en el contenido a impartir como en la forma y el tiempo en que tradicionalmente se imparten y se crearon materiales complementarios para suplir las deficiencias de los textos vigentes en el preuniversitario.

ADECUACIONES AL PROGRAMA DE FÍSICA DE DUODÉCIMO GRADO

Como resultado del análisis realizado, se aplicaron las siguientes transformaciones en el programa de la asignatura.

- Se agregó una unidad de *Introducción* para profundizar en elementos del álgebra vectorial y las reglas prácticas para el trabajo con números aproximados.

- *Unidad 1 Fuerzas en la naturaleza:* retomar la cinemática de la partícula profundizando en el movimiento de proyectiles, la representación gráfica de los movimientos y el concepto de fuerza centrípeta.
- *Unidad 2 Leyes de conservación:* se agregó el estudio del 2do Principio de la Termodinámica y el cálculo de la eficiencia de diferentes ciclos de máquinas térmicas.
- *Unidad 3 Movimiento del sólido rígido:* constituye un contenido nuevo para los estudiantes por lo que fue tratado teniendo en cuenta todos los aspectos (cinemática - dinámica - leyes de conservación).
- *Unidad 4 Introducción a la Teoría Especial de la Relatividad (TER):* también es vista por primera vez por los estudiantes y teniendo en cuenta la importancia que tuvo para el desarrollo de la Física por el cambio en las concepciones del espacio y el tiempo que estableció, pensamos que debía ser tratada con mayor profundidad que como aparece en el programa de 12 grado, por lo que además de estudiar la relatividad de los intervalos espaciales y temporales, se debe incorporar la relatividad de la simultaneidad, el teorema de composición de velocidades de Einstein, la relación entre masa y cantidad de movimiento en la TER, la ecuación que relaciona la masa y la energía y analizar sus aplicaciones y consecuencias en el desarrollo de la humanidad.

La tabla 1 muestra la distribución general de los contenidos por unidad y el tiempo asignado para cada especialidad (Física, Matemática, Química y Biología) con respecto a lo establecido por el MINED en el programa de duodécimo grado para el primer semestre:

Tabla 1

Distribución de contenidos por unidades y tiempo asignado para cada especialidad del Proyecto 12UH (Física, Matemática, Química y Biología) comparados a lo establecido por el MINED para el preuniversitario.

Unidad	Título	Tiempo en h/c		
		Física	M-Q-B	MINED
	Introducción	4	-	-
1	Fuerzas en la naturaleza	36	26	13
2	Leyes de conservación	22	14	13
3	Movimiento del Sólido Rígido	14	10	7
4	Teoría Especial de la Relatividad	14	8	5
	Evaluación	6	6	2
	Reserva	6	4	3
	Total	102	68	43

En el segundo semestre, en el Proyecto 12UH se decidió mantener la enseñanza de la Física, la Química y la Biología en las especialidades que las tienen incluidas en sus currículos universitarios, previa consulta con los especialistas de las Facultades a que ingresarían los estudiantes, adecuándolas a las necesidades planteadas por cada Facultad. Aclaramos que desde el curso 09-10 el segundo semestre del duodécimo grado del preuniversitario convencional se dedica solamente a repasar las asignaturas que tienen exámenes de ingreso a la educación superior (Lengua Española, Historia de Cuba y Matemática).

Para las especialidades de Química y Biología se decidió impartir un Curso de Introducción al Laboratorio Escolar que garantizara que los estudiantes adquirieran los elementos básicos para el trabajo experimental (2 h/c* x 12 Semanas = 24 h/c¹). Igual decisión se tomó para los físicos, pero con mayor carga horaria (6 h/c x 12 Semanas = 72 h/c).

En el caso de la especialidad de Matemática se decidió no impartir más Física, pues no tienen esta asignatura dentro de su currículo universitario.

EMPLEO DE LAS FORMAS DE ENSEÑANZA DEL NIVEL SUPERIOR

Como el alumno que ingresa al Proyecto 12UH, a pesar de que continúa siendo un alumno de la enseñanza media, ya se encuentra en los predios de un centro universitario, consideramos oportuno introducir las formas de enseñanza establecidas en la educación superior con el objetivo de crear un clima psicológico adecuado en los mismos y que paulatinamente vayan adaptándose a estas formas de enseñanza. A continuación se muestra la distribución de las formas de enseñanza y el tiempo asignado a cada una para el 1^{er} semestre, así como los métodos de enseñanza empleados:

- 20 conferencias (40 h/c): En las unidades 1 y 2, cuyos contenidos debían ser conocidos (al menos parcialmente) por los alumnos ya que fueron recibidos durante los grados 10 y 11, las conferencias se impartieron mediante el método de elaboración conjunta. En las correspondientes a las unidades 3 y 4, cuyo contenido reciben por primera vez, prevaleció el método expositivo.
- 20 clases prácticas (40h/c), consistentes en sesiones de resolución de problemas teóricos que se desarrollaron en pequeños grupos.
- 5 seminarios de resolución de problemas teóricos (10h/c), consistentes en sesiones de resolución de problemas teóricos que exigen creatividad por parte de los estudiantes. Estos se desarrollaron en pequeños grupos.

En el 2^{do} semestre para las especialidades de Química y Biología se concibieron 4 conferencias de introducción al laboratorio, 4 clases prácticas y 2 laboratorios y para la especialidad de Física, 4 conferencias de introducción al laboratorio, 4 clases prácticas y 6 laboratorios.

Paralelamente, con los estudiantes de la especialidad de Física, se organizaron Conferencias Magistrales (con frecuencia semanal), impartidas por algunos Doctores en Ciencia y especialistas que dirigen los grupos de investigación en la UH, las que permitieron elevar la motivación de los estudiantes por la asignatura y su formación vocacional dentro de la Física. Entre las conferencias, podemos citar: "Ferro-electricidad, presente y futuro" (Dr. J. Portelles), "Física y Música" (Dr. D. Stolik), "Rayos X, una mirada dentro de los materiales" (Dr. A. Pentón), "Aplicaciones del Magnetismo" (Dr. G. López), 11h/c es un turno de clase de 45 minutos. En el horario del Proyecto 12UH se planifican turnos dobles (2h/c).

"Superconductividad" (Dr. E. Altshuler), "Nanociencia y Nanotecnología" (Dr. O. de Melo), "Complejidad e Insectos Sociales" (Dr. E. Altshuler), "Láseres Semiconductores" (Dra. M. Sánchez-Colina), "Nanoespintrónica" (Dr. L. Diago), "Sistemas Complejos" (Dr. R. Mulet), "Estado actual y perspectivas de la Energía Fotovoltaica" (Dr. D. Stolik), "El Spin y el desarrollo futuro" (Dr. M. de Dios Leyva), "Microfluídica y Materia Activa" (Dr. E. Altshuler).



Fig. 1 *La primera hornada*. Foto de grupo de la primera graduación de estudiantes que cursaron el duodécimo grado en la Universidad de La Habana (curso 2009-2010). En la foto, tomada en al Aula Magna de la Universidad de La Habana, se identifica al Rector de esta institución, Dr. Gustavo Cobreiro, con saco negro. (Foto: Archivos de la Uniersidad de La Habana)

ELABORACIÓN DE MATERIALES COMPLEMENTARIOS

Como resultado del análisis de los libros de texto de 12 grado (que, en el momento histórico en cuestión, databan de la última década del siglo XX) se constataron limitaciones en el tratamiento del contenido que en estos aparece y que el número de problemas teóricos que se proponían era insuficiente y de carácter básicamente reproductivo. En el caso de los problemas experimentales la situación era más compleja, pues había que adaptar las actividades prácticas que el texto propone a las condiciones materiales de los Laboratorios de Física de la Universidad de La Habana. Además, fue necesario elaborar materiales para guiar a los jóvenes profesores universitarios (en la mayoría adiestrados) que fueron asignados para la docencia del Proyecto 12UH.

Para las clases prácticas de resolución de problemas teóricos se elaboró un folleto con problemas seleccionados de textos de Física General (V. Volkenshtein, Halliday-Resnick-Krane, Sears-Zemansky-Young-Freedman), Exámenes de Ingreso de Física y folletos de problemas elaborados por el MINED para los IPVCE.

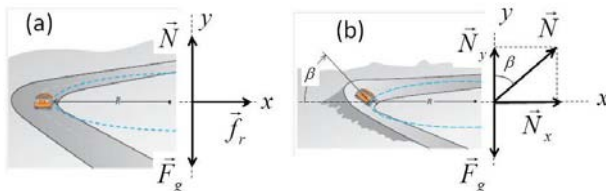
Para los seminarios de resolución de problemas teóricos se elaboró un folleto con preguntas y problemas de un nivel de complejidad y grado de generalización de los conocimientos superior a los desarrollados en las clases prácticas, muchos con enunciados cualitativos, donde la mayor parte de la

información no aparece explícitamente y que para su resolución es necesario recurrir a modelaciones e hipótesis, desarrollando de esta manera el conocimiento científico en los alumnos. En el recuadro, ponemos un ejemplo de este tipo de problemas.

¿Con qué velocidad máxima un auto puede tomar una curva sin deslizarse?

Este problema, formulado de forma muy general, implica que los estudiantes analicen situaciones de un nivel de complejidad creciente, comenzando, por ejemplo, por el caso de la curva plana con fricción (a), continuando con la curva con peralte sin fricción (b), y finalizando con la curva con peralte y con fricción. (En la figura, se representa el diagrama de cuerpo libre involucrando la fuerza de gravedad, la normal, y la fricción, en el caso (a)). Pero estas situaciones de complejidad creciente no son sugeridas a priori por el profesor.

Así, este problema constituye una situación nueva donde los estudiantes no saben qué estrategia seguir; no hay reglas para utilizar mecánicamente a modo de recetas para encontrar estrategias correctas: justo lo que ocurre en la investigación científica real. En la solución de la situación planteada se genera típicamente un debate entre los estudiantes en la clase, donde unos plantean sus puntos de vista y otros los rebaten o apoyan.



El estudiante, para elaborar la estrategia a seguir, tendrá que hacer simplificaciones, establecer modelos y plantearse hipótesis tales como: considerar la curva circular y que el auto se mueve con movimiento circular de rapidez constante, considerar primero la curva plana (sin peralte), con y sin rozamiento y luego considerar la curva inclinada (con peralte), con y sin rozamiento, etc., para ir acercándose al planteamiento del problema con toda su complejidad. Más tarde, con la eventual intervención del profesor, se llega incluso a discutir la influencia de la altura del centro de masa del auto en la estabilidad, etc.

En la tabla 2 se compara la cantidad de problemas teóricos (por unidades) para la realización de las clases prácticas y seminarios de resolución de problemas del 1er semestre y los problemas experimentales del 2do semestre, que forman parte de los folletos creados para el trabajo en el proyecto 12UH respecto a los que aparecen en los textos de duodécimo grado vigentes en 2010:

Unidades	Sistema de tareas (Proyecto)	Texto 12 Grado (MINED)
1	183	64
2	87	44
3	63	-
4	49	11
Total de Problemas Teóricos	382	119
Total de Problemas Experimentales	8	10

Estos folletos, además de ser utilizados en las siguientes ediciones del proyecto 12UH, fueron facilitados a los profesores de los institutos preuniversitarios (IPU) de La Habana en una actividad metodológica provincial realizada con el objetivo de que los utilizaran en la preparación de alumnos de duodécimo grado que opten por carreras de Ciencias Técnicas y Exactas.

LA EVALUACIÓN

En las clases prácticas y seminarios de resolución de problemas teóricos se evaluó el trabajo realizado por los diferentes equipos mediante la defensa de los problemas en el pizarrón por parte de algunos estudiantes y la discusión con el resto del aula. Ambas actividades siempre concluyeron con la realización de una evaluación escrita para todos los estudiantes.

Para los seminarios de problemas experimentales (laboratorios) los estudiantes agrupados en pequeños grupos, en tiempo extra-clase, analizaban las posibles soluciones del problema planteado: el día de la realización del laboratorio se discuten todas las propuestas y se ejecutan las más factibles. Después de desarrollado cada laboratorio, los estudiantes deben elaborar un informe escrito con todos los requerimientos. La evaluación de esta actividad contempla el diseño del experimento que hizo cada subgrupo, la manipulación de instrumentos y equipos, la habilidad demostrada por cada uno al realizar las mediciones durante la práctica, la calidad del informe entregado, y la defensa que haga cada equipo del mismo.

Además de la evaluación sistemática en las clases prácticas y seminarios de resolución de problemas, en el primer semestre se realizó un Seminario Investigativo, una Trabajo de Control Parcial (Prueba Intra-semestral) y una Prueba Final (Examen Estatal) que completan el sistema de evaluación.

EMPLEO DE MÉTODOS Y TÉCNICAS PARTICIPATIVAS

En todo el proceso de enseñanza, se dio prioridad a la actividad individual y colectiva de los estudiantes, de manera que se propiciara el desarrollo del razonamiento lógico y el pensamiento abstracto, la capacidad para resolver problemas (de gran importancia en la enseñanza de la Física) y la independencia cognoscitiva, pero al mismo tiempo, que se contribuyera al desarrollo de formas de comunicación colectivas, mediante el trabajo en parejas y pequeños grupos y la exposición y defensa de los resultados obtenidos.

Como es conocido, la utilización de métodos y técnicas participativas en la enseñanza contribuye al desarrollo de actitudes positivas hacia el aprendizaje, a la formación de valores en los estudiantes como la responsabilidad, promueve las relaciones entre los estudiantes, el desarrollo de habilidades para el estudio, la reflexión grupal, aumenta la motivación y la autoestima, entre otros.

CONCEPCIÓN DE ACTIVIDADES EXTRACLASES

Para desarrollar el conocimiento científico y elevar la motivación por la Física se concibió la realización de actividades extraclases, como las siguientes:

Seminario Investigativo 1: “Del Micro al Macro Mundo” Se orientó al comenzar el curso, se desarrolló con la formación de 8 equipos por cada grupo y se expuso al final del 1er semestre. Los equipos investigaron sobre temas que iban desde lo muy pequeño (partículas fundamentales, núcleos y átomos) hasta lo muy grande (el sistema solar, las estrellas, las galaxias, los cúmulos y supercúmulos, etc.), pasando por los diferentes modelos cosmológicos y de formación del Universo.

La exposición del Seminario se realizó en una Jornada Científica Estudiantil con premiación de los mejores trabajos por parte de un tribunal especializado y como conclusión de esta actividad se realizó una visita al Planetario del Municipio Habana Vieja, donde los estudiantes recibieron conferencias impartidas por especialistas del Instituto de Geofísica y Astronomía (IGA).

Seminario Investigativo 2 “Historia de la Física y su contribución al desarrollo de la humanidad” Se orientó al comenzar el 2^{do} semestre y se expuso al finalizar el curso. Para este seminario los grupos se dividieron en 8 equipos de estudiantes cada uno, con temas que iban desde la Física en la antigüedad hasta la Física de los días actuales y donde se valorara a la ciencia como empresa colectiva y se fundamentara la importancia de la Física para el desarrollo de otras ciencias, de la técnica y de la sociedad, se demostrara que la historia de una ciencia está estrechamente ligada a las personas que la desarrollaron, sus cualidades, esfuerzos y sacrificios, y a las condiciones sociales del país y la época histórica que les correspondieron, y se enfatizara en comprender el método científico de investigación al mostrar la mutabilidad de los conocimientos científicos a lo largo de la historia.



Fig. 2 *De primera mano.* Durante una visita al Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), estudiantes que cursan el duodécimo grado en la Universidad de La Habana para ingresar en la especialidad de Física, reciben una explicación sobre el funcionamiento del primer Microscopio de Efecto Túnel fabricado en nuestro país. (Foto: R. Fundora)

Visita a Centros de Investigación vinculados a la Universidad Se realizó una visita al Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), donde los estudiantes recibieron una

conferencia impartida por uno de sus directivos sobre los orígenes y el papel jugado por el centro en el desarrollo de la Ciencia en Cuba y luego realizaron un recorrido por los laboratorios, donde intercambiaron con los investigadores. Esto permitió elevar la motivación de los estudiantes por el estudio de la Física y su orientación vocacional hacia los diferentes temas de investigación que se llevan a cabo en este centro.

Encuentro con egresados de las ediciones anteriores Los egresados explicaron la importancia que tuvo para su formación haber pertenecido al Proyecto y respondieron las interrogantes de los actuales miembros del Proyecto 12UH con relación a su situación académica, las asignaturas en las que tienen más dificultades, sus perspectivas como estudiantes de Física e Ingeniería Física, su compromiso y sentido de pertenencia, etc.

RESULTADOS OBTENIDOS

Primera edición (Curso 09-10)

- El 100% de los alumnos aprobó en el Examen Estatal Ordinario.²
- El 92,1% obtuvo notas superiores a los 85 puntos.
- Dos estudiantes pertenecientes al proyecto resultaron ganadores en la Olimpiada Nacional de Física para el nivel preuniversitario (medallas de plata y bronce) y el estudiante ganador de la medalla de plata fue seleccionado para formar parte de la preselección nacional con vistas a la Olimpiada Internacional de Física.

Segunda edición (Curso 10-11):

- El 100% de los alumnos aprobó en el Examen Estatal Ordinario, mientras que en los preuniversitarios de la Habana sólo aprobó el 36,6 %.
- El 82,2% obtuvo notas superiores a los 85 puntos.
- El 76,4% de los alumnos egresados del Proyecto (de todas las especialidades) en su primera edición (09-10) aprobó limpio el primer semestre de la carrera universitaria, al comparar con el resto de la matrícula sólo lo hizo el 41,2%.
- Dos estudiantes pertenecientes al proyecto resultaron ganadores en la Olimpiada Nacional de Física para el nivel preuniversitario (medallas de plata y bronce).

Tercera edición (Curso 11-12):

- El 100% de los alumnos aprobó los Exámenes Estatales Ordinarios, contra el 56,2 % obtenido por los preuniversitarios de la Habana.
- El 99% obtuvo notas superiores a los 85 puntos y el 32,7% de la matrícula obtuvo 100 puntos.
- El 80,4% de los egresados del Proyecto en su primera edición aprobó todas las asignaturas en el primer semestre del 2do año de la carrera universitaria.
- El 70,6% de los egresados del Proyecto en su segunda edición aprobó todas las asignaturas en el primer semestre del 1er año de la carrera universitaria.

²En las ediciones 1 y 4 no tuvimos acceso a la información de los resultados obtenidos por los estudiantes de los IPU de La Habana en el Examen Estatal Ordinario.

- Seis estudiantes del proyecto ganadores en la Olimpiada Nacional de Física para el nivel preuniversitario (3 platas y 3 bronce).

Cuarta edición (Curso 12-13):

- El 100% de los alumnos aprobó los Exámenes Estatales Ordinarios.
- El 90,1% obtuvo notas superiores a los 85 puntos y el 32,7% de la matrícula obtuvo 100 puntos.
- Cinco estudiantes del Proyecto resultaron ganadores en la Olimpiada Nacional de Física para el nivel preuniversitario (1 oro, 2 platas y 2 bronce) y el estudiante ganador de la medalla de oro fue seleccionado para formar parte de la preselección nacional con vistas a la Olimpiada Internacional de Física.

El panel superior de la figura 3 muestra los resultados de promoción de las diferentes ediciones del Proyecto 12UH en el Examen Estatal de Física. Se puede apreciar el porcentaje de aprobados y el porcentaje de estudiantes con notas superiores a los 85 puntos. Este último indicador es utilizado para medir la calidad de los resultados en los IPVCE, y define la permanencia de los estudiantes en este tipo de centro.

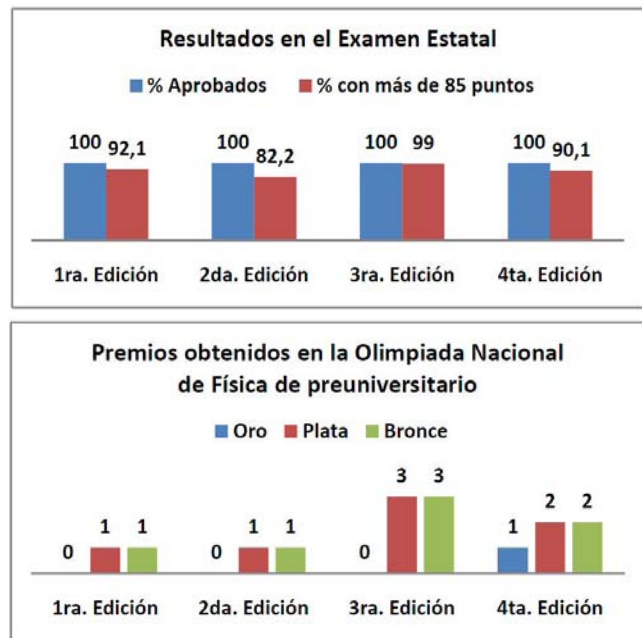


Fig 3. Logros de las cuatro ediciones del proyecto 12UH, en gráficos. Panel superior: Resultados de promoción en el examen estatal. Panel inferior: resultados de la participación en la Olimpiada Nacional de Física de nivel preuniversitario.

El panel inferior de la figura 3 resume los resultados obtenidos por los estudiantes del Proyecto 12UH en la Olimpiada Nacional de Conocimientos y Habilidades de Física. Nótese que en las últimas ediciones ha aumentado el número de premios obtenidos y el color de las medallas logradas.

CONCLUSIONES

El Proyecto 12UH ha combinado el aumento del rigor “técnico” de los programas de la asignatura Física de duodécimo

grado con el uso de conceptos de enseñanza-aprendizaje contemporáneos, como la combinación de métodos activos y grupales con el profesor como facilitador del proceso, llevando el protagonismo hacia el estudiante mediante la actividad cognoscitiva consciente.

Ello ha resultado en la adquisición de conocimientos y habilidades más sólidos y su aplicación creadora en la resolución de problemas teóricos y experimentales y a la realización de trabajos investigativos, lo cual se ha traducido en excelentes resultados en los exámenes de ingreso a la educación superior y en el rendimiento de los egresados del Proyecto 12UH una vez comenzados los estudios superiores.

Aunque más difícil de cuantificar, estimamos que el Proyecto 12UH también ha elevado la motivación por el estudio de la Física en los estudiantes, al vincular el contenido del aprendizaje con la práctica social.

Quizás algunos de los métodos utilizados en el Proyecto 12UH –especialmente aquellos vinculados a la resolución de problemas en equipo y de forma creativa– puedan ser evaluados para su introducción en algunas asignaturas de pregrado en la especialidad de Física.

El Proyecto 12UH se concibió originalmente como un paliativo temporal ante la precaria situación de la enseñanza de la Física a nivel preuniversitario, apuntando, entre otros objetivos, a “salvar” las carreras de ciencias exactas y naturales mediante la inyección de estudiantes bien preparados. Hoy día se están dando los primeros pasos para mejorar la calidad de la enseñanza de la Física en la enseñanza media a nivel nacional. Del éxito de esta empresa depende que la enseñanza del duodécimo grado para aspirantes a las carreras de ciencias exactas y naturales se mantenga o no dentro de los recintos universitarios.

[1] Colectivo de autores, *Estudio acerca de la eficiencia y la retención en la enseñanza universitaria en carreras de Ciencias Técnicas*. CUJAE. Informe final de investigación. Red de

centros de estudios sobre educación superior, MES (2011).

[2] Colectivo de autores, *Física. Décimo Grado*, (MINED. Editorial Pueblo y Educación, 1990).

[3] Colectivo de autores, *Física. Onceno Grado*, (MINED. Editorial Pueblo y Educación, 1990).

[4] Colectivo de autores, *Física. 12 Grado*, (MINED. Editorial Pueblo y Educación, 1990).

[5] Colectivo de autores, Libro de actas. Taller Iberoamericano de Enseñanza de la Física Universitaria. Facultad de Física. Universidad de la Habana. (1997).

[5] Colectivo de autores, *Los métodos participativos. ¿Una nueva concepción de la enseñanza?* (Centro de Estudios para el Perfeccionamiento de la Educación Superior (CEPES), Universidad de la Habana, 1998).

[6] D. Gil y P. Valdés, “Tendencias actuales en la enseñanza aprendizaje de la Física”, en *Temas escogidos de la didáctica de la Física*, (Editorial Pueblo y Educación, Ciudad de La Habana, 1996)

[7] O. Ginoris Quesada, *Fundamentos Didácticos de la Educación Superior Cubana*, (Editorial Félix Varela, La Habana, 2009).

[8] D. Halliday y col., *Física*, 4ta Ed. (Editorial Félix Varela, La Habana, 2003)

[9] I. E. Irodov, *Problemas de Física General*, (Editorial Mir, Moscú, 1985)

[10] O. F. Kabardin y E. Hernández, *Errores de las Mediciones*. Materiales para los IPVCE. MINED, 1995.

[11] S. Kosel *et al.*, *Problemas de Física*, (Editorial Mir, Moscú, 1986).

[12] V. N. Langue, *Problemas Experimentales Ingeniosos de Física*, (Editorial Mir. Moscú, 1979).

[13] R. Portuondo Duany, *Procesamiento de datos experimentales*, (Facultad de Física, Universidad de la Habana, 1988)

[14] F. W. Sears y col., *Física Universitaria*, 9na Ed. (Editorial Félix Varela, 2008).

[15] L. Tarasov, A. Tarasova, *Preguntas y problemas de Física*, (Editorial Mir, Moscú, 1984)

[16] P. Valdés y col., *Enseñanza de la Física Elemental en las condiciones actuales*, (Editorial Pueblo y Educación, La Habana, 2001).

[17] V. Volkensntein, *Problemas de Física General*, (Editorial Mir, Moscú, 1970).

THE HIGGS PARTICLE: WHAT IS IT, AND WHY DID IT LEAD TO A NOBEL PRIZE IN PHYSICS?

LA PARTÍCULA DE HIGGS: ¿QUÉ ES, Y POR QUÉ CONDUJO A UN PREMIO NOBEL EN FÍSICA?

W. BIETENHOLZ

Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México, A.P. 70-543, C.P. 04510 Distrito Federal, México

(Recibido 8/12/2013; Aceptado 10/12/2013)

Back in 1964, the theoretical physicists François Englert and Robert Brout, as well as Peter Higgs, suggested an explanation for the fact that most elementary particles —such as the electron— have a mass. This scenario predicted a new particle, which has been observed experimentally only just now at CERN (the European Organization for Nuclear Research). This discovery led to the Physics Nobel Prize 2013. Here we sketch in simple terms the concept of the Higgs mechanism, and its importance in particle physics.

En 1964, los físicos teóricos François Englert y Robert Brout, así como Peter Higgs, sugirieron una explicación para el hecho de que las partículas más elementales —como el electrón— tienen masa. Este modelo predijo la existencia de una nueva partícula, que ha sido observada recientemente en el CERN (la Organización Europea para las Investigaciones Nucleares). Este descubrimiento condujo al Premio Nobel en Física 2013. En esta contribución, ilustramos en términos simples el concepto del mecanismo de Higgs, y su importancia en la física de partículas.

PACS: Higgs bosons, 14.80.Bn, 14.80.Da, 14.80.Ec, 14.80.Fd, 14.80.Bn. Quantum field theory, 03.70.+k, 11.10.-z. History of science, 01.65.+g.

To the best of our knowledge, the world consists of only very few types of elementary particles, the smallest entities of matter, which are indivisible. They are described successfully by the Standard Model (SM) of particle physics, a great scientific achievement of the 20th century. All phenomena observed so far with elementary particles are compatible with the SM, which made a large number of correct predictions.

There is *one* particle that the SM needs in order to work, which has been observed only very recently: the famous *Higgs particle*. After intensive and careful work, the collaborations ATLAS and CMS, working at the Large Hadron Collider at CERN near Geneva (Switzerland), reported in December 2011 first hints of its observation. These hints were further substantiated in 2012, and the discovery of the Higgs particle is now generally accepted. Therefore Englert and Higgs have been awarded the 2013 Nobel Prize in Physics for their correct prediction (Brout passed away in 2011).

Hence the Higgs particle is now in the focus of interest in physics, and also in popular science. Unfortunately, the latter often denotes it as the “particle of god”, which sounds spectacular, but which does not make any sense whatsoever. If one assumes the creation of the Universe by some kind of god, then *all* particles are “particles of god”, and otherwise none is linked to theology, but there is no way to assign this rôle specifically to the Higgs particle. Here we hope to disseminate a better view what this myth-enshrouded particle is about.



Figure 1: François Englert (on the left), Peter Higgs (center-left) and CERN director Rolf-Dieter Heuer (on the right) celebrating the discovery of the Higgs boson, and the consequential Nobel Prize. The existence of this particle had been predicted in 1964. It was finally confirmed in 2011/2 at CERN.

The SM is formulated as a *Quantum Field Theory*. In physics, *fields* are abstract functions of space and time, *i.e.* on each point and at any time some field value is introduced.¹ This could be the temperature or the pressure in each point of a hall during one hour, or in an ocean during one year. A field may also have several components, which can be of a more abstract kind than

¹Here we refer to the “functional integral formulation” of Quantum Field Theory. Alternatively, the “canonical formulation” deals with operator valued fields, but the resulting physics is the same.

real numbers.² If we assign a specific field value to each space-time point under consideration, we obtain one *configuration*.

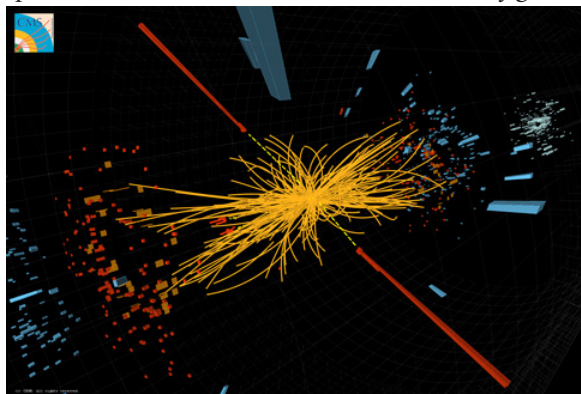


Figure 2: Tracks of elementary particles detected by the CMS Experiment at CERN in Geneva. The picture shows an event, which could give a hint about the Higgs particle, with two high energy photons (red bars that look long and straight in the picture) and other particles (yellow lines that look "curvy" in the picture), generated in a powerful proton–proton collision.

The occurrence of elementary particles is described by various types of fields. Their properties and dynamics are characterized by a function of the field configurations involved, known as the *action*. Classical field theory only considers one specific configuration of each field, the one that minimizes the action. For instance, if one performs this minimization for the electromagnetic fields, one obtains the Maxwell equations.

Quantum Field Theory, however, keeps track of the sum over all possible configurations. The one with minimal action or energy³ —it could be the zero fields— corresponds to the absence of particles, the *vacuum*. The additional energy that it takes for a fluctuation around this vacuum to generate just one particle is the *mass* of this particle.

Various fields —and the associated particles— may feel each other, *i.e.* they can interact, if the action contains a product of distinct fields that occur at the same point. In our understanding of the emergent complicated systems, *symmetries* play a key rôle. A symmetry is a group of transformations of the fields, which do not alter the action, so they are in general not observable. We distinguish *global* and *local* symmetries. A *global* symmetry allows us to change a field in the same way all over space and time —like an Aerobic session where many people move simultaneously in the same manner. *Local* symmetries are even more stringent: here the field can be changed in each space-time point in a different way, and still the action remains invariant. That appears like a chaotic Aerobic session, where everyone moves as he or she likes.

If one requires such a local symmetry to hold, a huge a number of field transformations are allowed, and it is a delicate challenge

²Field values can also be given by vectors, tensors or matrices (representing group elements), and their components could be complex numbers, or anti-commuting "Grassmann numbers".

³For simplicity, our discussion treats the *action* and *energy* as equivalent properties of a given field configuration. A transition to "imaginary time" is —for equilibrium states— a mathematically allowed transformation, which justifies this identification.

to maintain invariance under all of them. For the actions that one usually starts with, this is not the case —they do change under most local field transformations. However, one can repair the invariance by introducing additional fields, which transform exactly such that these changes are compensated. These are the *gauge fields*, which transmit an interaction between the "matter fields" that we had before. Moreover they represent own kinds of particles, such as the *photon* (the particle of light). In fact, the dominant interactions among the SM particles are transmitted by a set of gauge fields. This only works if the local symmetry is preserved exactly.

When this concept was developed, people noticed its virtues, but also a severe problem: the requirement of a local symmetry does not allow us to include any term in the action, which would simply specify some energy that it costs to "switch on the field", *i.e.* to deviate from a zero configuration, and therefore to represent a *particle mass* in its simplest form. Still we know that particles like the electron do have a mass. This was the puzzle that physics was confronted with in the 1950s, and which was later overcome by the famous Higgs mechanics.

The idea of this mechanism is that one does not necessarily need to refer to the zero field configuration. Instead one couples for instance the electron field to a new *Higgs field*, which is endowed with a self-interaction such that it takes its energy minimum for non-zero configurations. Then fluctuations away from this minimum require some energy, specifying a particle mass, while fully preserving the local symmetry. Now there is a whole set of non-zero field configurations corresponding to the minimal energy. The configurations in this set are related by local symmetry transformations, so physics is indeed invariant, and they all correspond to the same vacuum.

To provide an intuitive picture, we refer to a historic *Gedankenexperiment* (a "thought experiment"), known as "Buridan's donkey". *Jean Buridan* was a French scholastic



Figure 3: Jean Buridan, French philosopher and scientist of the 14th century, best known for the *Gedankenexperiment* with a hungry donkey.

Regarding Buridan's biography, we know that he was born in France around 1295, he studied philosophy at the University of Paris, where he was subsequently appointed professor in the Faculty of Arts, and also rector for two years. Around 1340 he condemned the views of his teacher and mentor William of Ockham, which has been interpreted as the dawn of religious skepticism and the scientific revolution. In the 15th century, Ockham's partisans placed Buridan's works on the Index of Forbidden Books.

Beyond that, Buridan's life is even more myth-enshrouded than the Higgs particle: according to some sources, he was forced to flee from France, spent time in Germany and also founded the University of Vienna in 1356 (or at least attended its foundation). Other records describe him as a charismatic and glamorous figure with numerous amorous affairs, which even involved the French Queen Jeanne de Navarre. Therefore King Philippe V (supposedly) sentenced him to be thrown in a sack into the Seine River, but he was saved by one of his students. Still another legend claims that he violently hit Pope Clement VI over the head with a shoe, trying to gain the affection of a German shoemaker's wife. Buridan died around 1358, possibly as a victim to the Black Plague.

philosopher of the 14th century, who was interested in logic, mechanics, optics, and in the existence and meaning of a “free will”.

As a general background, even before classical mechanics was worked out mathematically,⁴ scholars often had an entirely deterministic view of the world. In fact, mechanics seems to suggest that the course of any future evolution is strictly determined by the present state of the Universe, given by the current positions and velocities of all objects. Then the future should follow an inevitable pattern, like a huge machine proceeding step by step in a fully predictable way. Without knowledge about quantum physics (and discarding sudden jumps against the Laws of Nature), it is not obvious to find an objection against this picture.

However, its strict application would even capture mental processes in the brains of animals and human beings. This conclusion appeared confusing, since it implies that our “free will” is a plain illusion. In the context of this discussion, *Buridan’s donkey* was invented as a fictitious, extreme example.⁵ One imagines a hungry donkey, to whom one offers two piles of hay. However, they are fully identical and placed at exactly the same distance to its left and to its right. Hence the donkey has to make a decision for one direction in order to be able to eat. If nothing favors one of the piles, and its mind is fully deterministic, the poor donkey will stay in the middle and finally starve to death, although its salvation is so close. Taking a sudden decision corresponds to a process, which is denoted as “Spontaneous Symmetry Breaking” in Quantum Field Theory. Upon arrival at one of the piles, the donkey does not perceive the left/right symmetry (or “parity”) anymore.



Figure 4: Buridan’s donkey between two piles of hay, faced with the dilemma if it should walk to the left or to the right in order to eat. Taking a decision corresponds to the process of Spontaneous Symmetry Breaking.

To translate this setting into the Higgs mechanism, we should better talk about a thirsty donkey in the center of a circular water ditch. Now there is a continuous set of favored positions—corresponding to the energy minimum—anywhere next to the ditch. If we sum over all possible positions (all possible “donkey field configurations”), these favored positions provide the statistically dominant contributions. So if we evaluate the expectation value of its water supply, we conclude that the quantum donkey is better off than its classical cousin: it is

⁴Buridan himself worked on a theory of “impetus”, which is similar to our modern term “momentum”.

⁵According to some sources, it was actually invented by Buridan’s opponents to ridicule the deterministic point of view, by *reductio ad absurdum*.

able to drink. This reveals the importance of Quantum Field Theory⁶: in fact, it can be *live saving!*

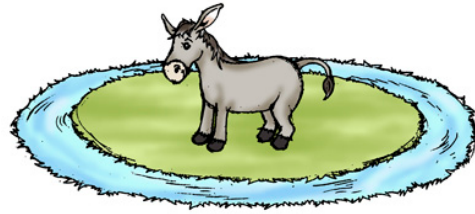


Figure 5: A modified donkey, now thirsty and surrounded by a water ditch. There is an infinite number of directions where it could go in order to drink. Its preferred positions are displaced from the starting point (at zero), next to the water. If it arrives there somehow, a motion along the ditch corresponds to a massless particle, known as a Nambu-Goldstone boson.

Once the donkey has attained the water, it can freely move along the ditch and keep on drinking. This kind of motion keeps the energy at its minimum. The corresponding fluctuation of the donkey field configuration does not cost any energy, hence it corresponds a massless particle, known as a *Nambu-Goldstone boson*.

If we now couple the donkey field—which takes the rôle of the Higgs field—to other fields, such as the one of the electron, the shift of the favored position away from the center (*i.e.* away from the zero configuration) yields the electron mass.

With gauge fields included, all positions at the ditch (with the energy minimum) are physically identical, since they are now related by local symmetry transformations. Thus a walk along the ditch is not a real motion anymore, and the Nambu-Goldstone bosons disappear again. Instead some of the gauge particles pick up a mass, in a subtle indirect way, which fully preserves the local symmetry.⁷

This happens for a suitable system a low temperature (in an infinite volume). The situation at high temperature could be sketched as pouring a lot of water into the area, hence the donkey does not need to move in order to drink. Then the procedure works with respect to its zero position, and no symmetry breaking occurs.

Let us repeat that any deviation away from the vacuum state costs energy, and here we capture the masses, for the electron and for other particles, without breaking the sacred principle of local symmetry. Several physicist noticed this property in the early 1960s. A corresponding mechanism was known in solid state physics, and applied also to particle physics by

⁶Even in Quantum Mechanics—the theory that preceded Quantum Field Theory in the first half of the 20th century—the phenomenon of Spontaneous Symmetry Breaking does not occur.

⁷The literature often calls this process a “spontaneous gauge symmetry breaking”, although any local symmetry (or gauge symmetry) transformation preserves the physical state, which solely describes the donkey’s proximity to the water. Therefore, strictly speaking the gauge symmetry does *not* break. In the SM this process provides masses for the three gauge bosons of the weak interactions (W^{\pm} , Z^0), and for all the fermions (quarks and leptons), but not for the photon and the gluons, which transmit the electromagnetic and the strong interaction, respectively.

François Englert and Robert Brout (in Bruxelles, Belgium), and independently by Peter Higgs. In particular, it was Peter Higgs —at that time a young lecturer at the University of Edinburgh (Scotland)— who (encouraged by Yoichiro Nambu) pointed out that this mechanism, when applied to particle physics, brings about a new particle, which should be observable. Its mass, however, could not be predicted,⁸ and the emerging mass of the other SM particles neither. This may be considered as a short-coming of the SM: it contains a number of free parameters (about 26, neutrino masses included), which one would like to reduce. On the other hand, for describing practically the whole Universe, this number is *not* alarming. For comparison, many fashionable theories beyond the SM (like “supersymmetry”) do not only lack any observational support, but they introduce in addition an avalanche of further free parameters.

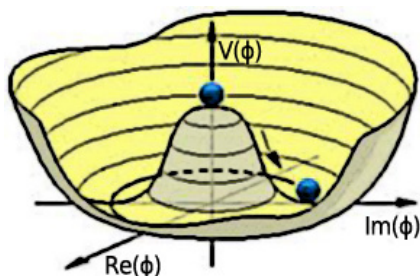


Figure 6: A potential $V(\phi)$ for a complex scalar field ϕ , which takes its minimal energy for non-zero field configurations $|\phi| > 0$. There is a continuous set of minima. Fluctuations within this set correspond to a Nambu-Goldstone boson. Once the field is gauged, all minima are physically identical, the Nambu-Goldstone boson disappears, but the gauge field picks up a mass.

Now the observation of the Higgs particle has been confirmed, so we can feel proud of a very well-established and elegant theory that describes all the elementary particles that we know of. So are we then done, and physicist will end up unemployed? Not really, even the great SM has its short-comings, that we still have to work on:

- It does not capture all interactions: the most obvious one in contemporary life, *gravity*, is not included. Intensive attempts (over several decades) to incorporate it have failed. Gravity is described successfully by a different theoretical framework, Einstein’s Theory of General Relativity, which seems simply incompatible with Quantum Field Theory. While this is an outstanding challenge, for practically all issues in particle physics it can be ignored, since gravitational effects are usually negligible in the microscopic context (an exception was the very early Universe).
- We have nowadays indirect but clear evidence of further ingredients to the Universe, denoted as *Dark Matter* and *Dark Energy*. Their nature is mysterious, and the SM cannot capture them —another tremendous challenge to work on.
- Even with known matter —consisting of the SM particles— *complex structures*, as they occur for instance in biology, are not simply understood based on the SM

⁸The “triviality” of the Higgs model (see below) implies at least an upper limit for the theoretically possible mass of the Higgs particle.

as the fundamental theory. Here a deep understanding of the collective behavior of many particles has to be supplemented, which has been accomplished only in part.

- Finally the SM has an intrinsic reason for being incomplete. A naïve treatment of Quantum Field Theories yields infinities in quantities that we want to compute. They diverge when we take field fluctuations at all energy scales into account. We can render them finite by introducing an energy cutoff, which should be done in a subtle way, preserving again the local symmetries. In some cases we can later —in the final result for physical observables— remove this cutoff by sending it to infinity. However, in case of the Higgs sector of the SM this does not work: it would lead to a decoupling of the Higgs field from all other fields, and therefore again to vanishing particle masses; that property is known as *triviality*.

So we have to live with such an energy cutoff, which is acceptable as long as it is far above the Higgs particle mass, but not high enough to render the Higgs field “trivial”, *i.e.* free of interactions. This implies that the validity of the SM is limited to a certain energy range —at even higher energies it requires the extension to a superior theory, that we do not know yet. The specialized literature suggests candidate theories in abundance, but so far none has been substantiated.

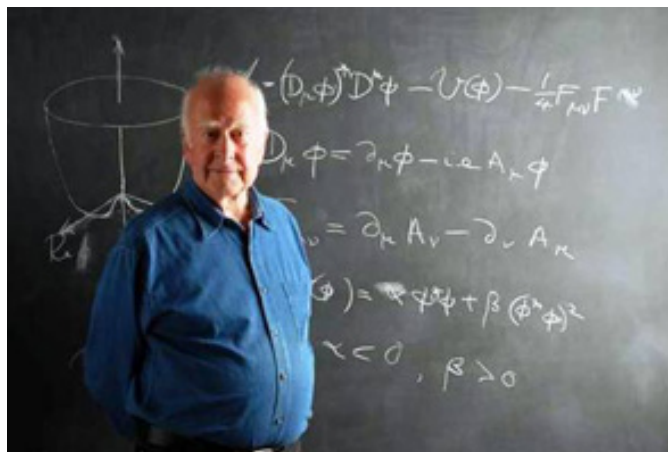


Figure 7: Peter Higgs, explaining the theory that predicts the famous particle named after him.

Nevertheless, even if we find one day corrections to the SM (under extreme conditions), it will always remain the appropriate description of particle physics in the energy range, which is most relevant to us —just like Newton’s theory of gravity, or the continuous description of thermodynamic systems, remain highly useful, although they are not exact.

I am indebted to Aline Guevara and Eduardo Serrano for their assistance with the illustrations. A shorter Spanish version of this article has been published —together with Daniella Ayala García— in the Boletín de la Sociedad Mexicana de Física **26**, 161 (2012).

EL PREMIO NACIONAL DE FÍSICA CAMBIA DE GÉNERO



Una sonrisa de medio siglo. Izquierda: Elena destaca al centro de esta foto tomada a fines de los años 60 del pasado siglo, rodeada por varios jóvenes profesionales de la Escuela de Física, donde el entusiasmo y la apostura se daban la mano (de izquierda a derecha: L. Hernández, A. Pérez, E. Vigil, Lourido y B. Reyes). Derecha: El presidente de la Sociedad Cubana de Física, Augusto González, entrega el Premio Nacional de Física “Manuel F. Gran” a Elena Vigil, el 28 de octubre de 2013 en el Aula Magna de la Universidad de La Habana. Al fondo, Luis Alberto Montero, presidente del Consejo Científico de la Universidad de La Habana. Fotos: archivos de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana.

Una de las personalidades más importantes de la Física del Estado Sólido en Cuba, la doctora Elena Vigil Santos, de la Universidad de La Habana, se ha alzado con el Premio Nacional de Física “Manuel F. Gran” de 2013. Es ella la primera mujer en recibirlo tras 5 galardonados del género masculino desde que se instauró el reconocimiento en el año 2011.

El premio fue entregado el 28 de octubre de 2013, en conmemoración del natalicio del físico cubano Manuel F. Gran, en el Aula Magna de la Universidad de La Habana. Tras recibirlo de manos del presidente de la Sociedad Cubana de Física, Augusto González, Elena dijo, con voz entrecortada: “Este premio es un estímulo a mi trabajo diario y, a la vez, un acicate para continuar trabajando”. Sin embargo, quienes la vemos a diario subiendo la empinada escalera de caracol que la conduce a su laboratorio, sabemos que la profesora Vigil nunca ha necesitado más estímulo que sus propias y poderosas convicciones para trabajar diariamente en una de sus grandes pasiones –la Física– prácticamente sin separarse un solo día de ella durante cerca de medio siglo.

Aquellos que tuvimos la suerte de recibir de Elena el curso de Física de Estado Sólido que ha ayudado a formar varias

generaciones de “solidistas” cubanos, tampoco dudamos que ése sólo hecho le hubiera granjeado un puesto en la historia de la Física en Cuba. Pero Elena ha dejado marca más allá de la docencia. Quizás sus aportes más conocidos a nuestra física hayan sido su contribución al diseño del primer diodo semiconductor producido en Cuba, y el haber concebido un experimento de crecimiento de materiales semiconductores que tuvo lugar en condiciones de micro-gravedad durante el vuelo conjunto Cuba-URSS al espacio extraterrestre que tuvo lugar en 1980.

La actividad del Aula Magna finalizó, empero, no con el pasado, sino con el futuro: Elena disertó durante cerca de una hora sobre las conversiones de energía solar en energía eléctrica mediante celdas fotovoltaicas –un tema que no la ha abandonado desde 1985, cuando decidió que sería esa la vía para unificar dos de sus grandes pasiones vitales: el desarrollo de su país, y su física.

E. Altshuler

LA REUNIÓN MÁS IMPORTANTE PARA LOS FÍSICOS CUBANOS SERÁ EN MARZO DEL 2014

En efecto, el XIII Simposio y XI Congreso de la Sociedad Cubana de Física tendrán lugar en La Habana, del 16 al 21 de marzo de 2014. El programa científico abarcará conferencias plenarias y sesiones de carteles. El domingo 16 de Marzo, previo al Simposio, tendrá lugar un “Show de Tecnologías”, que pretende incluir una muestra de equipos y productos relevantes para la tecnología concebidos por nuestros físicos. Con excepción de la muestra de tecnologías, todas las sesiones

tendrán lugar en la Universidad de La Habana, en los teatros y laboratorios del Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), de la Facultad de Química, y del Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (INSTEC).

Los tópicos principales a tratar incluirán la Agrofísica, Biofísica y Física Médica, Energías no Convencionales, Enseñanza de la Física, Física de la Materia Condensada, Física Nuclear,

Atómica y Molecular, Física Teórica, Física de la Tierra y el Espacio, Instrumentación, Óptica y Espectroscopia, Protección Radiológica

Entre los conferencistas invitados, estarán C. Cabal (CIGB, La Habana), A. Cabo (ICIMAF, La Habana), L. Díaz Cruz (Benemérita Universidad Autónoma de Puebla), O. Fernández (Universidad de Cienfuegos), P. Fernández (Universidad Complutense de Madrid), A. LeClair (Cornell University), M. Magnasco (Rockefeller University), L.A. Montero (Facultad de Química, Universidad de La Habana), R. Mulet (Facultad de Física, Universidad de La Habana), J.A. Otero (ICIMAF, La Habana), F. Quevedo (ICTP, Trieste), R. Rodríguez (Instituto de Nefrología, La Habana), S. Scandolo (ICTP, Trieste), D. Stolik (Facultad de Física, Universidad de La Habana), A.C. Valdés (IMRE, Universidad de La Habana), E. Vigil (Facultad de Física, Universidad de La Habana), y L. Visintin (ICTP, Trieste)

Los trabajos serán presentados en forma de cartel (de hasta 1 m x 2 m aproximadamente). Los resúmenes deberán enviarse por correo electrónico antes del 16 de Enero de 2014 a resumenes@ceaden.edu.cu. Deberán contener el título, los nombres de los autores con sus afiliaciones y el texto principal de entre 200 y 400 palabras. Se deberá indicar en el asunto del mensaje la inicial y apellidos del autor que lo presentará y el tópico con que se relaciona, por ej. "Resumen. A González. Física Teórica". Las memorias del evento serán publicadas en un número especial de la Revista Cubana de Física. Una vez aceptados los resúmenes, los interesados deberán redactar sus trabajos de acuerdo a las normas de la revista (<http://www.fisica.uh.cu/biblioteca/revcubfis/index.php/es>), enviarlos y someterse al procedimiento usual de revisión por pares.

Justo antes del Simposio, se impartirán varios cursos que requerirán de previa inscripción (los correos electrónicos

necesarios se anunciarán más adelante):

Tres experimentos avanzados de física, E. Altshuler (máximo 9 alumnos)

Temas de física moderna, H. Pérez Rojas

Microscopía electrónica, C. Lariot, IMRE, Universidad de La Habana (máximo 15 alumnos)

Formación y evaluación de competencias en física, C. Alvarez

Plasmas astrofísicos, A. Méndez

Óxidos semiconductores para la optoelectrónica, A. Iribarren

La trayectoria solar y sus aplicaciones, B. Henríquez

La aceptación de un resumen es sinónimo de registro en el Simposio. Las personas interesadas en participar, pero que no presentarán trabajos, deberán enviar un mensaje al mismo correo electrónico (resumenes@ceaden.edu.cu) con los siguientes datos: nombre y apellidos, institución y dirección postal. El asunto del mensaje tendrá el formato indicado antes, es decir "Inscripción. A. González". La fecha tope para el registro es el 16 de Enero de 2014.

El costo de la inscripción incluye los materiales del Simposio, los almuerzos de los días 17 al 21 de Marzo, la participación en el Show de Tecnologías, en los eventos paralelos y en un minicurso, previa inscripción. La inscripción para los participantes nacionales será de 250 CUP, y de 100 CUC para los extranjeros.

Augusto González

Presidente, Sociedad Cubana de Física

Instituto de Cibernética, Matemática y Física, Calle E 309, Vedado, La Habana

Tel: 537 8312806

agonzale@icimaf.cu

<http://www.fisica.uh.cu/scf/index.php/en/84-eventos/186-simposio2014>

NUESTRA FÍSICA EN NOTICIAS

20 VERANOS DE CIENCIA DE MATERIALES

Del 1 al 12 de julio de 2013 se celebró la vigésima Escuela Internacional de Verano de 2013 del Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE) de la Universidad de La Habana.

Las Escuelas de Verano comenzaron los años más duros de la crisis económica del último decenio del pasado siglo, impulsadas por la dirección del IMRE –especialmente por su subdirectora Elena Otazo– evidentemente para quedarse.

En la presente edición, profesores de Cuba, México, España, Alemania, Bélgica y Venezuela dictaron curso de láseres, microscopía electrónica, espectroscopía atómica y de fluorescencia de rayos X, Nanociencia y Nanotecnología, celdas solares, y otros temas.



Éramos tan jóvenes. Foto de algunos de los participantes de una de las primeras escuelas de verano de ciencia y tecnología de materiales organizadas por el IMRE. La primera dama de pie a la izquierda es Elena Otazo, promotora principal de las primeras escuelas. Foto: archivos del IMRE.

B. Concepción-Rosabal (IMRE)

TUVO LUGAR EL TERCER TALLER CUBA FOTOVOLTAICA

El importante asunto de la generación de energía fotovoltaica en Cuba fue debatido durante los días 25 y 26 de octubre de 2013, en el teatro Manuel Sanguily de la Universidad de La Habana. La reunión, una vez más organizada por D. Stolik, de la Universidad de La Habana, sirvió como marco de debate de múltiples aspectos concretos del uso de la energía fotovoltaica, incluyendo no sólo los científicos, sino los

tecnológicos y los económicos, extendidos muchas áreas de la sociedad. El evento incluyó una visita al parque fotovoltaico de EXPOCUBA.

E. Altshuler

CELEBRANDO DEL DÍA INTERNACIONAL DE LA FÍSICA MÉDICA

El pasado 7 de noviembre del 2013 tuvo lugar, en el Teatro del CEADEN, la Jornada “Nuevas tecnologías al servicio de la Medicina” en saludo al Día Internacional de la Física Médica. El evento fue organizado por la sección de Física Médica de la SCF y apoyado por la OPS y un conjunto de organizaciones nacionales. Contó con la participación de especialistas nacionales de prestigio que hablaron de las nuevas tecnologías y su impacto en el desarrollo de la física médica.

Durante la jornada se debatió la importancia de la capacitación y entrenamiento del personal para asumir estas tecnologías, la visión de que éstas sólo se emplean de forma óptima cuando se comprende que son sistemas multidisciplinarios donde cada especialista y cada técnico juegan un rol indispensable.

Se insistió en que se tiene mucho camino por delante y mucho esfuerzo por hacer, no sólo a favor del reconocimiento social

y económico de la profesión (pues nuestra realidad dista considerablemente de la de los países altamente desarrollados), sino también a favor de incrementar el papel en radiodiagnóstico y en radioprotección. Sin embargo, quedó claro que nuestros profesionales han alcanzado un gran prestigio a nivel regional y la especialidad ha dado pasos certeros en su organización y certificación.

Durante la clausura se homenajeó al Profesor Roberto Fraxedas Mayor por su labor durante más de 40 años como físico médico, durante los cuales se ha empujado como un ejemplo de profesionalidad y abnegación.

A. López-Díaz (Organizadora)
CEADEN

POR EL CENTENARIO DEL ÁTOMO DE BOHR

Los días 27, 28 y 29 de noviembre de 2013, se celebró, en La Universidad de San Gerónimo de La Habana, un Taller sobre los 100 años del Átomo de Bohr. La reunión sirvió como marco para la discusión de aspectos científicos, didácticos, culturales y filosóficos del modelo atómico de Bohr –una de las ideas que revolucionó la Física durante el primer cuarto del siglo XX. El evento, contó con la participación de personalidades nacionales entre las que destacan el presidente de la *Sociedad Cubana de Física*, A. González, el presidente de la *Sociedad Cubana de Historia de la Ciencia y la Tecnología*, José Altshuler, y los *Premios Nacionales de Física* H. Pérez, C. Cabal, C. Trallero, A. Cabo y E. Vigil. Entre los participantes extranjeros destacan J. Renn, Director del *Instituto Max Planck de Historia de la Ciencia* (Alemania), y los italianos C. Túniz, A. Baracca y M. d'Acunto. El evento, impulsado por M. de Dios (Fac. de Física, UH), recibió un notable apoyo organizativo por parte de O. Arias, G. Quintana (IMRE, UH), L. Diago (Fac. de Física, UH) y M. Hurtado (San Gerónimo)

E. Altshuler



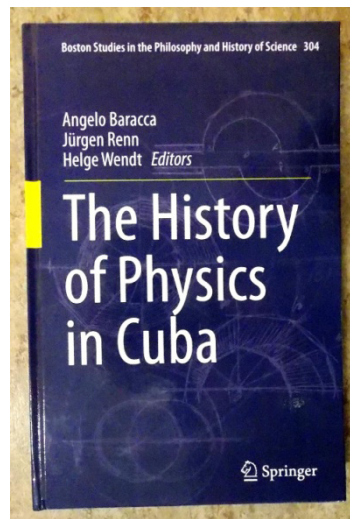
Los astros orbitan alrededor del Átomo de Bohr. El Taller sobre los 100 años del átomo de Bohr reunió en la Universidad de San Gerónimo de La Habana a todos los premios nacionales de Física, el día 28 de noviembre de 2013. En la foto, de izquierda a derecha, Carlos Cabal (2011), Melquíades de Dios (2011), Hugo Pérez (2011), Elena Vigil (2013), Alejandro Cabo (2012) y Carlos Trallero (2011). Foto: M. T. Pérez y E. Altshuler

LANZAN LIBRO SOBRE LA HISTORIA DE LA FÍSICA EN CUBA

Como parte de las actividades del *Taller sobre los 100 años del Átomo de Bohr*, se lanzó el mediodía del jueves 28 de noviembre de 2013 la pre-impresión del libro “The History of Physics in Cuba” en la Casa Simón Bolívar, en la Habana Vieja. La obra, publicada dentro de la serie *Boston Studies in the Philosophy and History of Science* (Springer), y editada por J. Renn, A. Baracca y H. Wendt, es el resultado de varios años de trabajo en

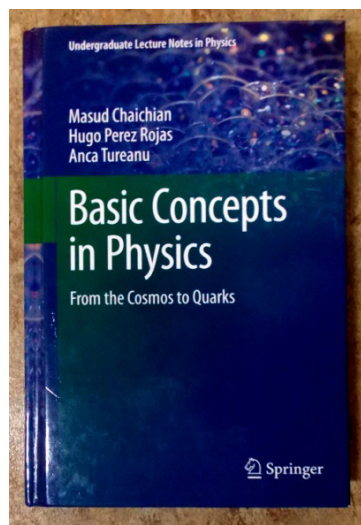
el que intervinieron unos 40 autores cubanos y extranjeros. El volumen, de más de 500 páginas de extensión, abarca, por vez primera, la Historia de la Física en Cuba desde su nacimiento hasta la época contemporánea.

E. Altshuler



Por vez primera, la historia completa de la Física en Cuba. En la imagen de la izquierda, el profesor J. Renn, director de Instituto Max Planck de Historia de la Ciencia, realiza la presentación del libro “The History of Physics in Cuba” en la tarde del día 28 de noviembre de 2013, en la Casa Simón Bolívar, de la Habana Vieja. En la presidencia se encontraban, de izquierda a derecha, Carlos Trallero (presidente del CLAF), Jürgen Renn (editor), A. Baracca (editor) y el profesor Carlos Rodríguez. A la derecha, una vista de la carátula del libro, editado por la prestigiosa casa Springer. Foto: E. Altshuler

BASIC CONCEPTS IN PHYSICS DE AUTORÍA CUBANA



Basic Concepts in Physics, From the Cosmos to Quarks, de la autoría de dos profesores finlandeses y el físico cubano Hugo Pérez-Rojas.
Foto: E. Altshuler

El Premio Nacional de Física Hugo Pérez-Rojas (ICIMAF, Cuba) es uno de los autores del libro “Basic Concepts in Physics, From the Cosmos to Quarks” recientemente publicado por la prestigiosa editorial Springer, dentro de la serie *Undergraduate Lecture Notes in Physics*. El tomo, del que son coautores M. Chaichian y A. Tureanu (Universidad de Helsinki, Finlandia) abarca, en sus casi 400 páginas, una ambiciosa proporción de la Física: desde las leyes de Newton, hasta la relación entre la Física y la Vida, pasando por la electrodinámica cuántica, la relatividad general y la cosmología, entre otros muchos temas.

E. Altshuler

