

FÍSICA

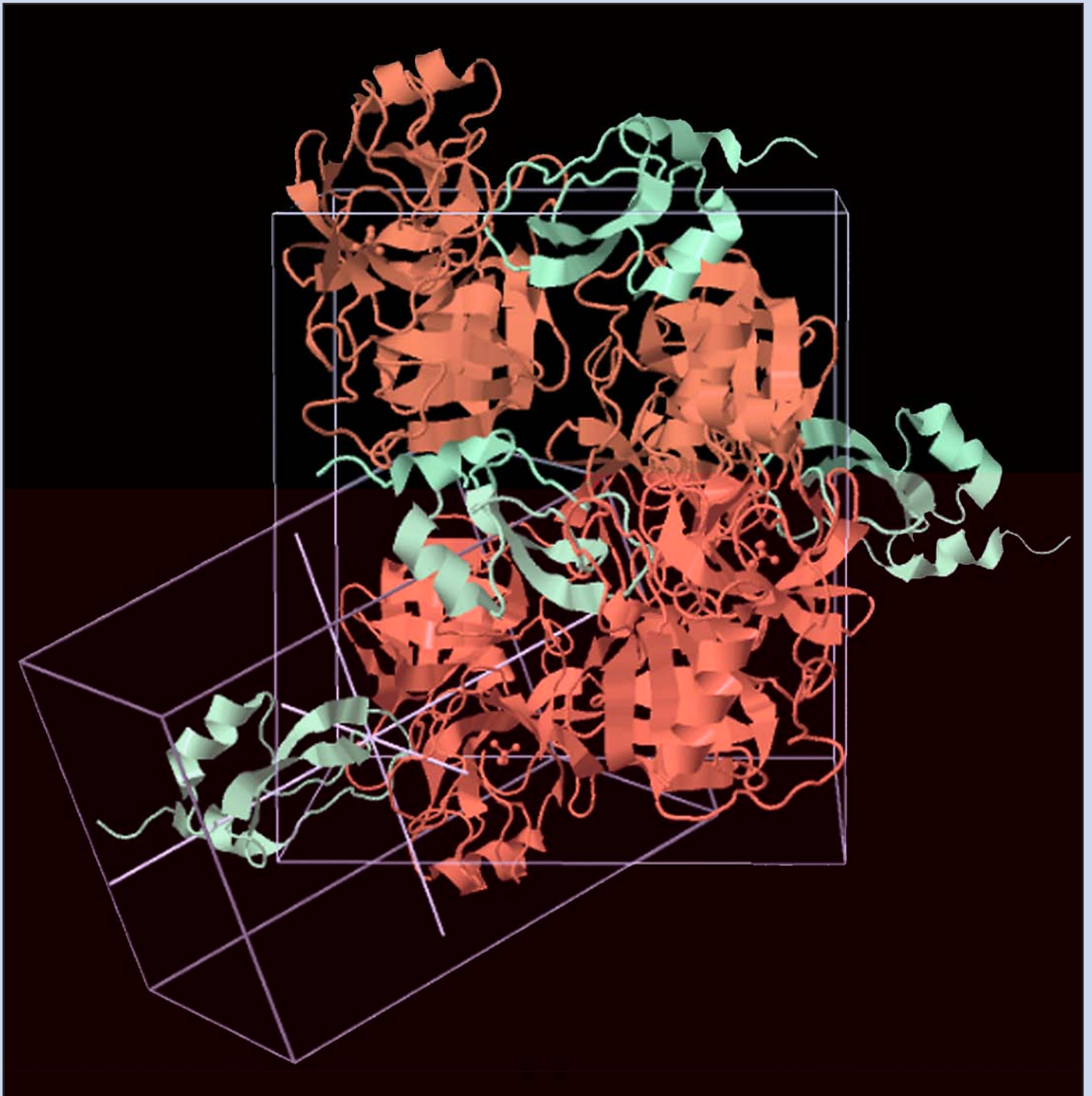
REVISTA CUBANA DE FÍSICA

FÍSICA

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

VOL. 31 No. 1
JULIO, 2014

EN EL AÑO INTERNACIONAL DE LA CRISTALOGRAFÍA



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.fossu@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: Cristal con una copia en la unidad asimétrica del complejo proteico entre la tripsina de páncreas bovino (rojo) y el inhibidor ShPI-1 (blanco) de la anémona marina *Stichodactyla helianthus*, cuya estructura tridimensional fue obtenida y resuelta por investigadores del Centro de Estudio de Proteínas, Facultad de Biología, Universidad de la Habana, Cuba. (resultados publicados en *J. Struct. Biol.* 180, 271, 2012).

COORDENADAS

3 UN SIGLO DE CRISTALOGRAFÍA MODERNA
[A CENTURY OF MODERN CRYSTALLOGRAPHY]
E. Estevez-Rams y A. Pentón-Madrigal

ARTÍCULOS ORIGINALES

5 EINSTEIN Y LA HIPÓTESIS DEL INTERCAMBIO ENERGÉTICO MONOFOTÓNICO
[EINSTEIN AND THE HYPOTHESIS OF SINGLE PHOTON ENERGY INTERACTION]
L. Martí-López, J. G. Darias-González, J. A. Ramos de Campos y E. E. Ramírez-Miquet (Ed. P. Muné)

10 INFLUENCE OF THE SINTERING CONDITIONS ON THE MICROSTRUCTURAL, DIELECTRIC AND PIEZOELECTRIC PROPERTIES OF La DOPED KNNTa CERAMICS
[INFLUENCIA DE LAS CONDICIONES DE SINTERIZACIÓN EN LAS PROPIEDADES MICROESTRUCTURALES, DIELECTRICAS Y PIEZOELECTRICAS DE CERÁMICAS KNNTa DOPADAS CON La]
J. Portelles, J. Fuentes, O. Raymond, J. Heiras, M. Cruz, C. Ostos, G. G. C. Arizaga and J. M. Siqueiros (Ed. O. de Melo)

15 ON THE PHOTOSYNTHETIC POTENTIAL IN THE OPEN OCEANS
[SOBRE EL POTENCIAL FOTOSINTÉTICO EN EL OCÉANO MUNDIAL]
L. Rodríguez, R. Cárdenas y D. Ávila-Alonso (Ed. V. Fajer)

18 SISTEMA DIGITAL INVARIANTE A POSICIÓN Y ROTACIÓN PARA EL RECONOCIMIENTO DE OBJETOS EN IMÁGENES MEDIANTE PERFILES DE INTENSIDAD*
[DIGITAL SYSTEM INVARIANT TO POSITION AND ROTATION TO OBJECT RECOGNITION IN IMAGES BY INTENSITY PROFILES*]
S. Solorza and J. Álvarez-Borrego (Eds. V. Fajer y J. Ravelo)

20 LA FLUORESCENCIA EN EL DIAGNÓSTICO DEL TEJIDO DENTAL*
[FLUORESCENCE IN THE DIAGNOSTIC OF DENTAL TISSUE*]
E. Purón, R. Homs y R. M. Payá (Eds. V. Fajer y J. Ravelo)

23 IMPLEMENTACIÓN DE UN AMPLIFICADOR LOCK-IN PARA LA MEDICIÓN DE ESPECTROSCOPIA ÓPTICA*
[IMPLEMENTATION OF A LOCK IN AMPLIFIER FOR OPTICAL SPECTROSCOPY MEASUREMENTS*]
R. Homs y E. Purón (Eds. V. Fajer y J. Ravelo)

26 DISEÑO Y CONSTRUCCIÓN DE UN DERMATOSCOPIO DIGITAL*
[DESIGN AND CONSTRUCTION OF A DIGITAL DERMATOSCOPE*]
E. Rojas, S. Stolik, J. de la Rosa, J. Espina y M. Pérez (Eds. V. Fajer y J. Ravelo)

COMUNICACIONES ORIGINALES

29 FOTOLUMINESCENCIA BLANCA EN SILICIO POROSO INFILTRADO CON SEMICONDUCTORES II-VI
[WHITE LUMINESCENCE IN POROUS SILICON EMBEDDED WITH II-VI SEMICONDUCTORS]
C. de Melo, G. Santana, J. Santoyo y O. de Melo (Ed. E. Altshuler)

32 ADSORPTION OF MOLECULAR HYDROGEN ON NANOSTRUCTURED SURFACES
[ADSORCIÓN DE HIDRÓGENO MOLECULAR SOBRE SUPERFICIES NANOESTRUCTURADAS]
A. Martínez-Mesa and G. Seifert (Ed. E. Altshuler)

35 OPTICAL MODEL OF THE UNACCOMMODATED HUMAN EYE
[MODELO ÓPTICO DEL OJO HUMANO SIN ACOMODACIÓN]
C. Muñoz-Villaescusa, O. Núñez-Chongo and A. J. Batista-Leyva (Ed. E. Altshuler)

38 OBTENCIÓN DE NANOHILOS DE CdS CATALIZADOS POR NANOPARTÍCULAS DE Au
[PREPARATION OF CdS NANOWIRES CATALYZED BY Au NANOPARTICLES]
P. G. Zayas-Bazán, K. Gutiérrez Z-B, G. Santana, O. Vázquez, J. Santoyo-Salazar, G. Contreras-Puente, J. C. González y O. de Melo (Ed. E. Altshuler)

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

-
- 41 **INTRAMOLECULAR VIBRATIONAL ENERGY REDISTRIBUTION IN THE RELAXATION DYNAMICS OF TWO CO ON Cu (110)**
[REDISTRIBUCIÓN DE ENERGÍA VIBRACIONAL EN LA RELAJACIÓN DE DOS MOLÉCULAS DE CO ADSORBIDAS SOBRE Cu (110)]
Ll. Uranga-Piña and J. C. Tremblay (Ed. E. Altshuler)

PARA FÍSICOS Y NO-FÍSICOS

- 45 **THE MOST POWERFUL PARTICLES IN THE UNIVERSE: A COSMIC SMASH**
[LAS PARTÍCULAS MÁS PODEROSAS DEL UNIVERSO: UN REMATE CÓSMICO]
W. Bietenholz (Ed. E. Altshuler)

51 **NUESTRA FÍSICA EN NOTICIAS**

COMENTARIOS

- 55 **LETTER TO THE EDITOR: ON A NON-CONTRADICTORY BEGINNING OF THE UNIVERSE**
[CARTA AL EDITOR: SOBRE UN COMIENZO DEL UNIVERSO NO-CONTRADICTORIO]
F. L. Falcón (Ed. E. Altshuler)

UN SIGLO DE CRISTALOGRAFÍA MODERNA

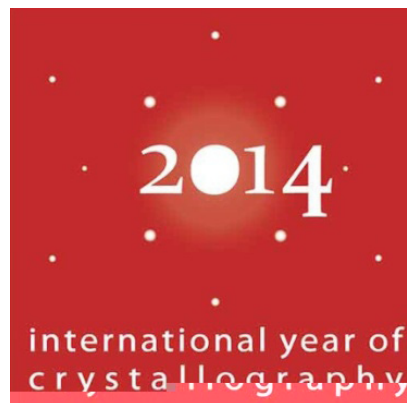
A CENTURY OF MODERN CRYSTALLOGRAPHY

E. Estevez-Rams y A. Pentón-Madrigal
Facultad de Física, Universidad de La Habana, Cuba

La UNESCO ha declarado el año 2014 como el Año Internacional de la Cristalografía, bajo las siglas UYCr. La nominación se hace para reconocer la importancia que esta disciplina ha tenido en el desarrollo científico y tecnológico de la humanidad. Estrechamente vinculada a la revolución de la física a principios del siglo XX, la cristalografía como disciplina tiene una historia mucho más vieja, que se expande ya por varios siglos y muchos personajes famosos dentro y fuera del mundo científico.

El 23 de abril de 1912 los alemanes Walter Friedrich y Paul Knipping realizaron el primer experimento de difracción de rayos X por un sólido (Un cristal de ZnS) bajo la conducción de Max von Laue, que ganó el Premio Nobel de 1914 por este experimento. El descubrimiento no sólo estableció el carácter electromagnético de los rayos X, sino demostró firmemente que los cristales son sólidos con un arreglo periódico de átomos. El 11 de noviembre de 1912, el británico William Henry Bragg presentó la ecuación que lleva su nombre a la *Cambridge Philophical Society*, que permite comprender los patrones de difracción de rayos X en cristales. Junto con su hijo, William Lawrence Bragg, recibieron el premio Nobel de Física en 1915 por sus hallazgos. En tan sólo medio año, la cristalografía moderna había sido creada. Curiosamente, el primer premio Nobel de Física, otorgado en 1901, había correspondido al alemán Wilhelm Conrad Röntgen por el descubrimiento en 1896 de los Rayos-X: con este premio se abrió una tradición de laureados nobeles por descubrimientos esenciales en la historia de la cristalografía. La página web de la Unión Internacional de Cristalografía (IUCr por sus siglas en inglés: www.iucr.org) recoge veintinueve de tales premios repartidos entre Física, Química y Medicina.

La idea de la difracción se le presentó a Laue cuando examinaba a un estudiante de doctorado de nombre Paul Peter Ewald, que versaba sobre un modelo matemático para la difracción óptica en redes tridimensionales. Según las propias memorias de Ewald, Laue le preguntó si su aparato matemático podía aplicarse en el supuesto caso de que un sólido fuera un arreglo periódico tridimensional de átomos. Tras la respuesta afirmativa —narra Ewald— Laue estuvo con la mente ausente durante el resto del examen. Lo cierto es que Laue, que trabajaba bajo la supervisión de Sommerfeld, presentó sus ideas a este profesor en el famoso café de *Hofgarten* en Munich, donde en varias sesiones maduraron hasta diseñar el histórico experimento. Ciertamente, resulta difícil asegurar que las discusiones “de café con leche” no son productivas.



Que tantos premios nobeles estén repartidos entre las tres disciplinas de la naturaleza cubiertas por este galardón no es en absoluto una sorpresa por estos días: la cristalografía moderna ha sido un área del conocimiento en la frontera de varias disciplinas que ha influido esferas en apariencia tan disímiles como la geología, la biología molecular y las telecomunicaciones. Pero no siempre fue así. El gran Johann Wolfgang von Goethe, de quien pudiera argumentarse que fue el autor de la primera novela con un científico como protagonista, fue un entusiasta estudioso de los cristales, que escribió: “La cristalografía, considerada como ciencia, levanta puntos de vistas muy peculiares. No es productiva, solo existe para sí misma y no tiene consecuencias (...) Como no es útil en ningún lado, se ha desarrollado en su mayor parte dentro de sí misma.” [1]. Mucho ha llovido desde entonces. Hoy es harto conocido el protagonismo de la cristalografía en la elucidación de la naturaleza de múltiples estructuras claves en el avance de la humanidad: desde la sal común o el hierro, hasta la insulina, la hemoglobina, el ADN, los superconductores, los semiconductores y, más recientemente, los grafenos y las estructuras aperiódicas. Gracias a la cristalografía sabemos por qué el diamante es la estructura más dura de la naturaleza y el grafito es tan frágil —a pesar de que ambos en el fondo se componen sólo de átomos de carbono. Gracias a la cristalografía hemos logrado describir la estructura de las proteínas, el acoplamiento de fármacos con sus receptores, los mecanismos de transporte a nivel celular y las funciones de la membrana celular. No habría ciencia de materiales como la conocemos hoy si no descansara sobre la cristalografía. El teorema de Bloch, piedra angular de la Física del Estado Sólido, es un corolario de un teorema de teoría de grupos aplicado a los cristales.

Como otras áreas de las ciencias naturales, la cristalografía, a la que se le acusaba de haber agotado su campo a mediados del siglo pasado y que su avance sólo ocurriría en términos de instrumentación y métodos, tuvo una nueva revolución “copernicana” cuando en 1984, el israelita Dan Shechtman

(Premio Nobel 2011) descubrió que en la naturaleza existían sólidos con orden de largo alcance, que sin embargo, no era periódico. El descubrimiento no sólo conmovió los cimientos de la disciplina, sino que sus ecos telúricos han alcanzado a la Ciencia de Materiales, la Física del estado Sólido (¿necesitamos un nuevo teorema de Bloch?), las matemáticas y la teoría de Fourier (al “descubrir” que no sabemos las condiciones necesarias y suficientes para una transformada de Fourier discreta). La sacudida ha provocado una revisión profunda de qué sabemos y qué no sabemos en términos de orden atómico, y se ha abierto la puerta hacia un universo fértil de nuevos emprendimientos indagadores. El advenimiento de la nanotecnología y estructuras novedosas como los fulerenos, los nanotubos y las nanocebollas, entre otras, solo ha hecho ampliar ese campo hasta límites no divisibles en la actualidad.

En Cuba la cristalografía ya se impartía como disciplina a inicios del pasado siglo en la Universidad de La Habana. El Dr. Santiago de la Huerta y Ponce de León (1870–1941), profesor titular de Mineralogía y Geología de nuestra casi tricentenaria casa de altos estudios, en una comunicación en las Memorias de la Sociedad Poey (sesión del 28 de abril de 1921) titulada “*Sobre procedimientos de enseñanza de la cristalografía geométrica*” destacaba la importancia científica de la cristalografía, y su utilidad para los matemáticos, físicos, químicos y naturalistas. Mencionaba también los prejuicios respecto a la dificultad y aridez de las nociones fundamentales de esta ciencia que era, al mismo tiempo, según su criterio, de una sencillez y belleza extraordinarias.

El fomento de la cristalografía en nuestro país realmente comenzó a partir de la etapa revolucionaria. En el CENIC se nucleó un grupo de pioneros que a partir de la década de 1970 creció y se consolidó, siendo reconocidos a nivel latinoamericano e internacional, donde pueden mencionarse nombres como Ramón Pomés y Angel Dago, entre otros. De estos soplos crecieron otros vientos, y en la Universidad de La Habana y la Universidad de Oriente también se comenzó a trabajar en la disciplina: Francisco Cruz, Alberto Serra y José Ramón Quiñones fueron tres de los pioneros en la primera institución. Para mediados de los ochenta del pasado siglo, Cuba tenía probablemente una de las escuelas de cristalografía mejor establecidas de toda Latinoamérica.

Lamentablemente, la crisis de los noventa cambió ese panorama completamente. El deterioro creciente de una infraestructura necesariamente cara, unido al fallecimiento, la jubilación y la emigración de la mayoría de los cristalógrafos cubanos, han puesto al borde de la desaparición nuestra otrora vigorosa escuela cristalográfica. Cuba, uno de los primeros miembros de la Unión Internacional de Cristalografía (IUCr), ya no pertenece a la organización desde hace más de veinte años por insolvencia. Necesariamente la formación de recursos humanos en esta área se ha visto seriamente afectada por la falta de infraestructura y el éxodo de muchos jóvenes recién formados. El deterioro de la cristalografía cubana ha ocurrido en una coyuntura donde esta disciplina se ha vuelto central en

el desarrollo de áreas que el país ha señalado como prioritarias: la industria farmacéutica y biotecnológica, las energías tanto convencionales como renovables, el medio ambiente, la defensa, y los materiales de la construcción, entre otros. La dependencia de laboratorios externos para el análisis cristalográficos de todos los fármacos y proteínas sintetizados o aislados en los centros de investigación del país, es una importante limitante en nuestro desarrollo biofarmacéutico, que representa un real peligro de cara a las exigencias regulatorias, el espionaje industrial y la propiedad intelectual. Tal capacidad de análisis, que se tuvo en cierta medida hasta finales de los ochenta del siglo XX, hoy es en la práctica inexistente por la falta de infraestructura: crear escuelas de conocimiento tarda décadas; su desaparición puede ocurrir en muy corto tiempo.

En los últimos años, la cristalografía en Cuba se ha refugiado esencialmente en la Universidad de La Habana, dentro de las áreas de los materiales, la física del estado sólido y las biomoléculas. A pesar de las dificultades, se ha participado con trabajos científicos, incluyendo conferencias orales invitadas, en algunos de los principales eventos internacionales de la disciplina, incluyendo los Congresos Internacionales de la IUCr, donde un cubano es el único miembro latinoamericano de su Comisión de Cristalografía Matemática y Teórica. Recientemente Cuba estuvo presente en la fundación de la Asociación Latinoamericana de Cristalografía (LACA) ocurrida en Córdoba, Argentina, en noviembre del 2013. Quizás el desarrollo más importante ha sido la presencia continua de investigadores nacionales en facilidades de radiación sincrotrón alrededor del mundo [2]: Cuba es el tercer país con mayor presencia de proyectos en el Laboratorio Nacional de Luz Sincrotrón de Brasil (LNLS). La Universidad de La Habana ha organizado ocho escuelas internacionales de cristalografía con el auspicio de la IUCr.

Recuperar la cristalografía en el país se vuelve imprescindible en un escenario de recuperación y de apuesta al desarrollo basado en la ciencia. Seremos capaces de lograrlo si no le damos la espalda a lo que se ha hecho y somos capaces de incorporar como protagonistas a los pocos cristalógrafos que tenemos hoy en el país. Construir sobre lo que se tiene –especialmente cuando ha demostrado su capacidad de perdurar temporal y espacialmente a pesar de las dificultades– es la única manera de crear una obra perdurable, sostenida y sostenible. Cometer el error de recomenzar desde “tabla rasa” sólo haría retroceder aún más una escuela de conocimiento que forma ya parte de la historia científica de un país que apostó por los caminos de la ciencia en enero de 1959.

[1] J. W. Goethe, *Conversation of German refugees. Wilhelm Meister's Journeyman Years or The Renunciants* (Princeton University Press, New Jersey, 1943).

[2] A. Pentón-Madrigal, E. Estévez-Rams, E. Reguera, J. Rodríguez-Hernández, B. Concepción-Rosabal, Y. García-Basabe, R. García-Fernández, A. Talavera, E. Moreno, *Rev. Cub. Fis.* **30**, 36 (2013).

EINSTEIN Y LA HIPÓTESIS DEL INTERCAMBIO ENERGÉTICO MONOFOTÓNICO

EINSTEIN AND THE HYPOTHESIS OF SINGLE PHOTON ENERGY INTERACTION

L. MARTÍ-LÓPEZ,^a J. G. DARIAS-GONZÁLEZ,^{a†} J. A. RAMOS DE CAMPOS^b Y E. E. RAMÍREZ-MIQUET^a

a) Centro de Aplicaciones Tecnológicas y Desarrollo Nuclear, La Habana, Cuba. darias@ceaden.edu.cu[†]

b) Instituto Tecnológico de Óptica, Color e Imagen, Valencia, España.

[†] autor para la correspondencia

(Recibido 28/6/2013 ; Aceptado 12/12/2013)

Se plantea la hipótesis de Einstein y se analiza su papel en el desarrollo de la Teoría del Efecto Fotoeléctrico, el Modelo de Bohr del átomo de Hidrógeno y las leyes fundamentales de la Fotoquímica. Un ejemplo de proceso de interacción que no cumple la hipótesis de Einstein, la absorción multifotónica, es analizado y una de sus aplicaciones descrita.

Einstein's hypothesis is posed and applied to the development of the Theory of Photoelectric Phenomena, the Bohr's Theory of the Hydrogen Atom and the main laws of Photochemistry. An example of interaction process not satisfying Einstein's hypothesis known as multiphoton absorption is analyzed and one of its applications is described.

PACS: Photodetachment atomic ions 32.80.Gc; Multiphoton absorption by surfaces, 79.20.Wsr

INTRODUCCIÓN

Hace poco más de un siglo, uno de los más grandes genios que ha dado la humanidad, Albert Einstein, realizó tres grandes contribuciones a la ciencia: la teoría de la relatividad especial, la teoría del efecto fotoeléctrico y la teoría del movimiento browniano. Todas esas contribuciones marcaron profundamente el desarrollo ulterior de la Física en sus respectivos campos y son referencia obligada en textos no solo de Física general. Aunque de esas contribuciones quizá la más conocida es la teoría de la relatividad especial, el Premio Nobel le fue conferido por su teoría del efecto fotoeléctrico. Cuando se leen esos trabajos de Einstein se halla que su influencia es mucho mayor de la que se deriva de sus conclusiones principales, por mucho que ellas sean gigantescas. Esos trabajos están llenos de ideas nuevas y audaces, que influyeron poderosamente en los científicos de su generación y de generaciones posteriores. A una de estas ideas, la llamada hipótesis de Einstein, se dedica el presente trabajo.

La hipótesis de Einstein a la que nos referimos en este trabajo, es la suposición de que la interacción de los fotones con los sistemas cuánticos es monofotónica, es decir, que en cada acto de interacción participa un solo fotón del flujo de radiación. Durante los 100 años transcurridos desde que esa hipótesis se aplicó por primera vez [1] se ha utilizado una y otra vez, en forma implícita, como algo evidente, y frecuentemente sin mencionar que, como en muchos otros escenarios de la Física actual, el genio de Einstein estaba detrás de esa suposición. En los primeros 60 años de aplicación de esa hipótesis no se dieron las condiciones que permitieran dudar del cumplimiento de la misma. Con la creación de fuentes de luz, capaces de emitir haces de muy alta potencia y alta direccionalidad, los láseres,

se hizo posible obtener altas densidades de fotones. Como consecuencia, comienza el estudio intensivo de fenómenos ópticos propios de las altas densidades de fotones y entre ellos, los procesos multifotónicos.

Un objetivo fundamental del presente trabajo es rendir un homenaje a Albert Einstein. Creemos que lo mejor para ello es ejemplificar como una de sus ideas audaces, la hipótesis que lleva su nombre, y que, aunque ha pasado casi sin atención en el contexto de sus grandes contribuciones de 1905, ha tenido una gran influencia en el desarrollo ulterior de la Física. Hemos analizado tres ejemplos clásicos de la aplicación de la hipótesis de Einstein: la teoría del efecto fotoeléctrico, el modelo de Bohr del átomo de hidrógeno, y las leyes básicas de la fotoquímica. Para terminar analizamos un proceso al cual no se le aplica la hipótesis de Einstein, la absorción multifotónica y una de sus aplicaciones más interesantes, la microscopía confocal multifotónica.

LA HIPÓTESIS DE EINSTEIN Y EL EFECTO FOTOELÉCTRICO

Con el trabajo de Planck [2] el carácter corpuscular de la luz fue establecido en forma bastante abstracta y se expresaba como una cierta forma de emisión discreta de energía. En este sentido con el trabajo de Einstein sobre el efecto fotoeléctrico externo [1], la situación cambia. En la explicación del efecto fotoeléctrico externo el carácter corpuscular de la luz se expresa en forma mucho más evidente, a través de razonamientos y ecuaciones que no son propios de la teoría electromagnética de la luz y que parecen sacados de la mecánica de Newton.

El efecto fotoeléctrico externo fue descubierto experimentalmente

por H. R. Hertz [3]. Este fenómeno ocurre cuando la luz incide sobre un metal (por ejemplo, cesio, sodio, o potasio) y le arranca electrones. Los electrones salen despedidos del metal con una energía cinética mensurable. Si la frecuencia de la luz no es suficientemente grande (o, equivalentemente, la longitud de onda de la luz no es suficientemente pequeña) el efecto fotoeléctrico no se observa. Cuando se observa, su inicio tiene un retraso muy pequeño, del orden de 3 ns [4], respecto al inicio de la irradiación.

Tratemos de modelar el proceso anterior con la teoría electromagnética. Supongamos que sobre la superficie del metal incide una irradiancia I , constante en el tiempo, que actúa sobre ella durante un intervalo de tiempo Δt . En la aproximación ondulatoria la magnitud de la irradiancia es proporcional al cuadrado del módulo de la amplitud de la onda

$$I = \alpha |A|^2, \quad (1)$$

donde α es una constante de proporcionalidad y A es la amplitud de la onda. Consecuentemente, la densidad superficial de energía recibida por la superficie U_{total} durante un intervalo de tiempo Δt será

$$U_{\text{total}} = \int_0^{\Delta t} I_e dt = P_e \Delta t = \alpha |A|^2 \Delta t, \quad (2)$$

donde P_e es el flujo radiante.

Esa onda penetraría un poco dentro del metal (la profundidad de penetración de la onda electromagnética, el *skin depth*) y pondría a oscilar en forma forzada a los electrones del metal (se considera que ellos forman un gas electrónico) y una vez que hubiesen acumulado bastante energía comenzarían a salir del metal, independientemente de la frecuencia de la luz. Como el campo eléctrico está distribuido sobre una gran área, la intensidad con la que actuaría sobre los electrones es relativamente pequeña y habría que esperar un tiempo relativamente largo (del orden de los minutos o más, dependiendo de las condiciones del experimento que se escoja modelar) para que los electrones acumulen energía suficiente para escapar del seno del metal. Comprendido de esa manera el proceso es prácticamente igual a como un horno de microondas doméstico calienta a un objeto metálico colocado en su interior. Evidentemente, esta descripción no coincide con lo que se observa en el efecto fotoeléctrico.

En la aproximación corpuscular, tendríamos que

$$I = Nhf, \quad (3)$$

donde N es el número de fotones que por unidad de tiempo y unidad de área llegan a la superficie, $h = 6.626 \times 10^{-24}$ Js es la constante de Planck y f es la frecuencia de los fotones. La energía total recibida U_{total} será

$$U_{\text{total}} = hf \int_0^{\Delta t} N dt = hfN \Delta t, \quad (4)$$

donde se ha supuesto que N es constante.

La diferencia entre las expresiones (2) y (4) no está tanto

en sus formas, sino en sus significados. Como ya se dijo, en la descripción electromagnética la energía de la onda está distribuida sobre la superficie del metal y penetra una cierta profundidad en él, mientras que en la descripción corpuscular la energía está concentrada espacialmente en cada fotón y en el espacio entre los fotones no hay energía. La interacción de los fotones con los electrones sería una colisión.

La interacción fotón-electrón debe cumplir con el principio de conservación de la energía, por lo que podemos escribir una ecuación de balance energético. Cuando ocurre la colisión, la energía hf aportada por el fotón se emplea en vencer la energía potencial que mantiene a los electrones en el seno del metal y la energía sobrante se convierte en energía cinética del electrón. Para el electrón más rápido, con mayor energía cinética, que se logra extraer del seno del metal podemos escribir que:

$$hf = W + \frac{1}{2} m_e v_{\text{max}}^2, \quad (5)$$

donde W es el trabajo de extracción, m_e es la masa en reposo del electrón y v_{max} es el módulo del máximo de la velocidad del electrón. Note que como la velocidad del electrón es pequeña no es necesario aplicarle mecánica relativista.

De la fórmula (5) se deduce que si

$$hf > W, \quad (6)$$

se puede extraer el electrón, mientras que si

$$hf < W, \quad (7)$$

ello no es posible.

Este resultado está en concordancia con los experimentos y no puede ser obtenido de la teoría ondulatoria electromagnética de la luz. La cantidad de electrones que por unidad de área se logran extraer depende de la probabilidad de que ocurra la interacción y de otros factores.

En la ecuación (5) es donde por primera vez se aplica la hipótesis de Einstein: en ella se supone implícitamente que la absorción es monofotónica. Y decimos implícitamente porque no encontramos en el trabajo de Einstein un análisis formal de la validez de esa suposición.

LA HIPÓTESIS DE EINSTEIN EN EL MODELO DE BOHR DEL ÁTOMO DE HIDRÓGENO

El modelo de Bohr [5] del átomo de hidrógeno se basa en dos postulados:

Primer postulado El electrón del átomo describe un movimiento de traslación en una órbita circular entorno al núcleo de manera que su momento angular L está cuantizado, esto es, solo puede tomar valores discretos, dados por la expresión

$$L_n = n \frac{h}{2\pi}, \quad n = 1; 2; 3; \dots \quad (8)$$

A partir de esta suposición y utilizando las expresiones del potencial de Coulomb y las leyes de la mecánica clásica Bohr dedujo una expresión para la energía de los electrones, que, como consecuencia de la cuantización del momento angular, (6) también estaba cuantizada y podía tomar valores de un conjunto discreto de valores

$$\{E_n, n = 1; 2; 3; \dots\}. \quad (9)$$

Para vincular las variaciones de energía del electrón con la energía de los fotones absorbidos o emitidos por el átomo Bohr introdujo un segundo postulado.

Segundo postulado El electrón, al variar su energía la libera o absorbe en forma de un fotón y que en ese proceso se cumple el principio de conservación de la energía. Si utilizamos la expresión de la energía de un fotón podemos escribir la ecuación de balance energético para este proceso

$$hf = |E_q - E_p|, \quad (10)$$

donde $\{E_q, q = 1; 2; 3; \dots\}$ es la energía inicial del electrón y $\{E_p, p = 1; 2; 3; \dots\}$ es la energía final del electrón ($q \neq p$). Si $E_q - E_p > 0$ se emite un fotón, mientras que si $E_q - E_p < 0$ el fotón se absorbe.

A partir de las fórmulas (8), (10), de la fórmula que enlaza la longitud de onda con la frecuencia $\lambda_v f = c$, donde c es la velocidad de la luz en el vacío y después de algunas transformaciones se obtiene la fórmula para las líneas espectrales del átomo de hidrógeno que se había obtenido gracias a los trabajos de investigación realizados por Balmer y Rydberg

$$\frac{1}{\lambda_v} = R_H \left| \frac{1}{p} - \frac{1}{q} \right|, \quad (11)$$

donde R_H es la constante de Rydberg, que toma el valor $R_H = 10967758.1$ para el hidrógeno ${}_1\text{H}^1$.

En el segundo postulado nos encontramos de nuevo la hipótesis de Einstein: el proceso se considera monofotónico y, como en el propio trabajo de Einstein sobre el efecto fotoeléctrico, esa suposición se acepta como algo evidente, que no necesita ser justificado.

LA HIPÓTESIS DE EINSTEIN, LA EMISIÓN INDUCIDA Y LA ESTADÍSTICA DE BOSE - EINSTEIN

En su trabajo de 1917 sobre radiación del cuerpo negro e interacción de los fotones con sistemas cuánticos [6], Einstein utiliza un modelo de la interacción que no se describe estructuradamente en ese artículo, por lo que sus bases hay que extraerlas del texto. Para los fines del presente trabajo las sintetizamos de la siguiente forma:

- Se postula la existencia de la emisión espontánea, la absorción y la emisión estimulada de fotones por sistemas cuánticos. Dichos procesos tienen naturaleza

probabilística.

- Esos procesos son monofotónicos. Aquí hemos hecho explícita la hipótesis de Einstein.
- Esas transiciones que dan lugar a esos procesos se describen por funciones que adoptan formas matemáticas excepcionalmente simples.
- Tanto la radiación como el sistema cuántico están en equilibrio térmico.

Es un poco sorprendente que una de las bases del modelo, la hipótesis de Einstein sobre el carácter monofotónico de los procesos de absorción y emisión no haya despertado cierta suspicacia, tanto en ese momento como posteriormente. ¿Cómo es posible que las propiedades estadísticas de los fotones dependan de cómo es su interacción con un sistema de partículas con niveles discretos de energía? Y cuando la radiación está en equilibrio térmico pero sin interactuar con ese sistema de partículas ¿tendrá propiedades estadísticas diferentes? Y si cambian las propiedades del sistema de partículas, ¿cambia la estadística de los fotones? Estas y muchas más preguntas similares se pueden formular aquí.

Lo interesante del caso es que después de los trabajos de Bose [7], se puso en claro que la estadística de los fotones no dependía de cómo era su interacción con los sistemas de partículas y, por tanto, que la hipótesis de Einstein era innecesaria. No obstante, en algunos textos de Física General y de Electrónica Cuántica la estadística de los fotones se introduce a partir del trabajo de Einstein, sin un análisis crítico de la suposición del carácter monofotónico de los procesos.

LA HIPÓTESIS DE EINSTEIN, LA LEY DE EQUIVALENCIA FOTOQUÍMICA Y LA LEY DE RECIPROCIDAD

Las reacciones fotoquímicas son un ejemplo claro del carácter corpuscular de la luz y de la aplicación de la hipótesis de Einstein. La ley de equivalencia fotoquímica es una de las principales leyes de la fotoquímica; ella enlaza la energía luminosa con el producto de una reacción fotoquímica. Para deducir la ley de equivalencia fotoquímica haremos las siguientes suposiciones:

- Los fotones tienen energía suficiente para que ocurra la reacción. Esta es una condición similar a la condición para que ocurra el efecto fotoeléctrico (6).
- La sustancia fotosensible absorbe una energía luminosa U_{abs} compuesta de fotones de energía hf .
- Las especies que intervienen no se agotan durante la reacción fotoquímica.
- En cada reacción se producen q partículas del producto.
- Se cumple la hipótesis de Einstein, es decir, el proceso es monofotónico.

Entonces, el número total de partículas del producto η , es

$$\eta = q \frac{U_{\text{abs}}}{hf}. \quad (12)$$

Obviamente, la masa M del producto de reacción es

$$M = \eta m = \frac{U_{\text{abs}}}{hf} qm, \quad (13)$$

donde m es la masa de la partícula producto.

Las expresiones (12) y (13) son dos formas de la ley de equivalencia fotoquímica. El inconveniente de ellas es que dependen de la energía absorbida, una magnitud muy difícil de medir. Para expresarla de una manera más práctica escribiremos dicha ley en forma diferencial e introduciremos suposiciones y transformaciones complementarias.

Consideraremos que el diferencial de energía absorbida es proporcional al diferencial de energía incidente, esto es, $dU_{\text{abs}} = \chi dU$, donde dU es el diferencial de energía incidente y χ es una función que depende de la geometría del problema y de la probabilidad de que ocurra el proceso de absorción. Teniendo en cuenta además que $dU = P dt$, donde P es el flujo radiante incidente y dt el infinitesimal de tiempo, podemos escribir que

$$M = mq \int_0^{\Delta t} \frac{\chi P}{hf} dt, \quad (14)$$

donde Δt es el tiempo de exposición. Aplicando el teorema del valor medio obtenemos

$$M = mq \frac{\overline{\chi P \Delta t}}{hf}, \quad (15)$$

donde $\overline{\chi P}$ es el producto χP evaluado en un punto intermedio entre 0 y Δt .

Si χ y P no dependen del tiempo obtenemos que

$$M = mq \frac{\chi}{hf} P \Delta t. \quad (16)$$

Si el parámetro χ no varía apreciablemente con la situación práctica de la irradiación, el factor $mq\chi/(hf)$ es constante y se puede hacer una calibración del proceso. Entonces se puede saber la masa M que reacciona si se controla el flujo radiante y el tiempo de exposición.

La expresión (16) se conoce como ley de reciprocidad o ley de Bunsen–Roscoe. Esta ley fue obtenida en experimentos en el siglo XIX; algunas de las expresiones matemáticas que se derivan de ella se usan en campos tan diferentes como la fotografía y la terapia láser, por poner dos ejemplos sencillos. Nótese que en la base de todas las derivaciones anteriores está la hipótesis de Einstein. No obstante, si suponemos que la reacción es multifotónica, las expresiones anteriores siguen siendo válidas, y solo necesitamos corregir la constante de proporcionalidad. Sin embargo, las excepciones que en la práctica se encuentran a la ley de equivalencia fotoquímica y a la ley de Bunsen–Roscoe no están dadas por el incumplimiento de la hipótesis de Einstein. El agotamiento de las sustancias reaccionantes y la variación de las condiciones en que transcurre la reacción son, entre otras causas, las que más influyen en ello.

ABSORCIÓN MULTIFOTÓNICA

Uno de los ejemplos más evidentes de procesos que no cumplen con la hipótesis de Einstein es la absorción bifotónica. Los procesos de absorción bifotónica requieren de una gran concentración de fotones, debido a las pequeñas secciones de interacción de esos procesos, de 10^{-48} a 10^{-50} cm⁴s [8]. Eso significa que la irradiancia debe ser de al menos 20 MW/cm². Pudiera parecer que esa irradiancia es muy elevada y solo se puede alcanzar con láseres de muy alta potencia, pero ello no es así. Consideremos, por ejemplo, una pinza óptica (*optical tweezer*) lograda al hacer converger la radiación de un diodo láser de $\lambda_v = 808$ nm con un flujo radiante de salida de 100 mW a un círculo de unos 600 nm de diámetro y un área de unos $0.3 \mu\text{m}^2$. En esas condiciones la irradiancia media en ese círculo es 33 MW/cm² aproximadamente, suficiente para que los procesos de absorción bifotónica se manifiesten. Irradiancias suficientes para lograr la absorción bifotónica se obtienen en algunos experimentos de holografía e interferometría, pero, como no son experimentos para investigar la absorción bifotónica, ella no es detectada.

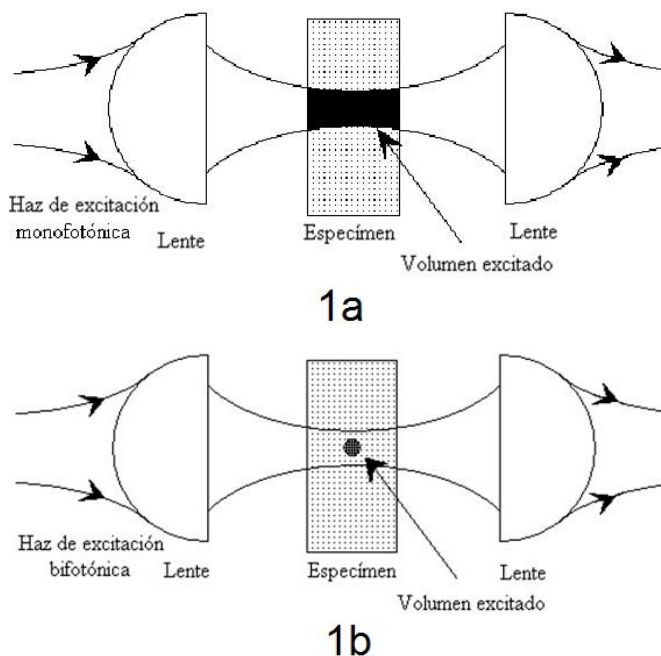


Figura 1: Ilustración de los volúmenes excitados: 1a) mediante absorción monofotónica, 1b) mediante absorción bifotónica.

El que los procesos de absorción bifotónica requieran altas densidades de fotones es una ventaja en algunas aplicaciones de microscopía confocal de fluorescencia. Para explicar esta aplicación consideremos un espécimen tratado con un colorante adecuado para producir fluorescencia al ser excitado con fotones de longitud de onda λ_v . Si en un microscopio confocal de fluorescencia realizamos la excitación del espécimen con esa longitud de onda, un volumen relativamente grande va a ser excitado y es necesario introducir un filtro espacial (*pinhole*) para eliminar la radiación proveniente de las zonas de la muestra que no se están barriendo y que solo empeoran la señal óptica. Por los efectos de la difracción, ello impone un

límite inferior a la imagen de estructura que se puede capturar (Fig. 1a). Si se emplea excitación bifotónica con longitud de onda $\lambda_{v2} = 2\lambda_{v1}$ la zona donde se cumple la condición para la excitación bifotónica es mucho más pequeña (es del orden de décimas de femtolitro) y el filtro espacial se hace innecesario [9-10] (Fig. 1b). Pero las ventajas de la fluorescencia bifotónica no se reducen a esto. Unos de los problemas de la excitación monofotónica de la fluorescencia es el fenómeno del blanqueado óptico (*Photobleaching*) que consiste en la pérdida de las propiedades de fluorescencia del colorante bajo los efectos de la excitación.

Pues bien, con la excitación bifotónica el fenómeno de blanqueado óptico se reduce considerablemente. La explicación más extendida a esta propiedad es que ello se debe a que el volumen donde se obtiene la excitación bifotónica es mucho menor que el volumen donde ocurre la absorción monofotónica (Figs. 1a y 1b).

En las aplicaciones el uso de haces continuos (*cw*) no es conveniente, pues en ese caso las altas potencias se asocian a efectos fototérmicos y de trampa. Por ello se usan láseres pulsados de alta frecuencia de repetición con potencias de pico entre 1 W y 1 kW y bajas potencias medias entre 1 μ W y 1 mW.

CONCLUSIONES

La hipótesis de Einstein tiene dos virtudes: llegó justamente cuando hacía falta y es muy simple. La genialidad de Einstein se revela precisamente en esos dos conceptos, siempre marchó a la vanguardia de la ciencia de su tiempo y su pensamiento siempre buscó la explicación más transparente, más sencilla y, por tanto, más sólida. Hubo de transcurrir más de medio siglo antes que la Física encontrara procesos en los que la hipótesis de Einstein no fuese aplicable, aunque desde mucho antes se veía que los procesos multifotónicos debían existir pues no se conocía una ley física, al estilo de las reglas de selección, que

en general los prohibieran. Los procesos multifotónicos no escaparon a la percepción de Einstein; simplemente, la Física de su tiempo le imponía otros retos.

Por otra parte, los procesos multifotónicos tienen una probabilidad de ocurrencia mucho menor que los procesos monofotónicos. Eso, que pudiera considerarse un inconveniente, es una de las propiedades que permiten confinar la interacción a volúmenes extremadamente pequeños durante intervalos de tiempo muy cortos. El uso de la absorción multifotónica y su particularidad de que ocurre en volúmenes extremadamente reducidos la hacen un instrumento muy prometedor no solo para aplicaciones de microscopía confocal; la nanociencia, la nanotecnología y nanomedicina tienen mucho que esperar de ella.

Los autores queremos dedicar este trabajo a la memoria del Dr. Luis Martí López, un físico cubano que encontró en Albert Einstein una motivación extraordinaria para su desarrollo científico. Quisiéramos expresar nuestro agradecimiento al Laboratorio LAAS-OSE con sede en la ENSEEIHT del Instituto Nacional Politécnico de Toulouse por su cooperación al proporcionar parte del material bibliográfico.

-
- [1] A. Einstein, *Ann. der Physik* **17**, 132 (1905).
 - [2] M. Planck, *Ann. der Physik* **4**, 553 (1901).
 - [3] H. Hertz, *Electric Waves*, (Macmillan, London, 1893).
 - [4] E. O. Lawrence, y J. W. Beams, *Phys. Rev.* **32**, 478 (1928).
 - [5] N. Bohr, *Phyl. Mag.* **26**, 476 (1913).
 - [6] A. Einstein, *Z. Phys.* **18**, 121 (1917).
 - [7] S. N. Bose, *Z. Phys.* **26**, 178 (1924).
 - [8] K. König, *Histochem. Cell Biol.* **114**, 79 (2000).
 - [9] P. E. Hänninen, E. Soini, y S. W. Hell, *J. Microsc.* **176**, 222 (1994).
 - [10] M. J. Booth, y S. W. Hell, *J. Microsc.* **190**, 298 (1998).

INFLUENCE OF THE SINTERING CONDITIONS ON THE MICROSTRUCTURAL, DIELECTRIC AND PIEZOELECTRIC PROPERTIES OF La DOPED KNNTa CERAMICS

INFLUENCIA DE LAS CONDICIONES DE SINTERIZACIÓN EN LAS PROPIEDADES MICROESTRUCTURALES, DIELÉCTRICAS Y PIEZOELÉCTRICAS DE CERÁMICAS KNNTa DOPADAS CON La

J. PORTELLES,^{a,b} J. FUENTES,^{a,b,†} O. RAYMOND,^b J. HEIRAS,^b M. CRUZ,^b C. OSTOS,^{b,c} G. G. C. ARIZAGA^b AND J. M. SIQUEIROS^b

a) Facultad de Física, Universidad de La Habana, La Habana 10400, Cuba. jfuentes@fisica.uh.cu.†

b) Universidad Nacional Autónoma de México, Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Ap. Postal 14, Ensenada 22800, B.C, México.

c) Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, México DF, 04510, México.

† corresponding author

(Recibido 3/10/2013; Aceptado 30/5/2014)

Two batches of lead free ceramics of the composition $(K_{0.5}Na_{0.5})_{0.95}La_{0.016}Nb_{0.9}Ta_{0.1}O_3$ (KNNTaLa) were sintered between 1150 and 1180 °C. In the first batch, the samples were prepared in a sealed crucible embedded in powders of the same composition and, in the second, they were sintered in open air. Measurements made by X-ray diffraction, scanning electron microscopy and analysis of the phase transition and electromechanical response show, in general, a better performance for the encapsulated samples where very high values of density are obtained (about 97% of the theoretical density). La doping of KNNTa ceramics shifts its transition temperatures toward lower values, from 361 °C to 317 °C for the tetragonal-cubic (ferroelectric-paraelectric) and from 187 °C to 150 °C for the orthorhombic-tetragonal (ferroelectric-ferroelectric) transitions in this particular composition. The obtained electromechanical parameters are reasonably good and show the potentiality of the KNNTaLa ceramic as a commercial piezoelectric material.

Dos series de cerámicas libres de plomo de composición $(K_{0.5}Na_{0.5})_{0.95}La_{0.016}Nb_{0.9}Ta_{0.1}O_3$, fueron sinterizadas entre 1150 y 1180 °C. En la primera serie las muestras fueron preparadas en un crisol encapsulado embebido en el polvo de la misma composición, mientras que la segunda fue preparada al aire. Los resultados obtenidos por la difracción de rayos X, microscopía electrónica de barrido, análisis de la transición fases y la respuesta electromecánica muestran, en general, un mejor desempeño de las muestras encapsuladas en las que fue obtenido un alto valor de la densidad (cerca del 97% del valor teórico). El dopamiento con La de las cerámicas KNNTa desplaza la temperatura de transición a valores menores, de 361°C a 317 °C para la transición tetragonal-cúbica (ferroeléctrica-paraeléctrica) y de 187 °C a 150 °C para la ortorrómbica-tetragonal (ferroeléctrica-ferroeléctrica). Los parámetros electromecánicos obtenidos son razonablemente buenos y muestran el potencial del KNNTaLa como material piezoeléctrico comercial.

PACS: Piezoelectric materials, 77.84.-s; Ceramics piezoelectricity, 77.84.Dy; Permittivity, 77.22.Ch; Electromechanical resonance, 77.65.-j

INTRODUCTION

It is well known that many useful devices, simple or sophisticated such as capacitors, actuators, ultrasound sensors and sources, proximity detectors, SAW filters, among others, are based on the extraordinary properties of the $Pb(Zr_{1-x}Ti_x)O_3$ piezoelectric family, particularly in compositions around its morphotropic zone in the phase diagram [1,2,3]. Despite the excellent properties of PZT based materials, these compounds have the obvious disadvantages associated with the volatility and the toxicity of PbO which can pollute the environment and damage human health. Therefore there is a great demand for alternative lead-free piezoelectric materials with high performance. It is for this reason that in the last years material scientists have tried very hard to find a suitable lead free substitute for PZT [4,5,6,7]. In this line of thought, in 2004, Japanese scientists obtained a compound with properties

comparable to those of PZT based on the complex perovskite $KNbO_3-NaNbO_3$ (KNN) doped with Ta, Li and Sb, using a complex and original preparation process. The result was a textured ceramic with good physical properties [8]. In spite of this initial success, great efforts are currently being dedicated to improve on such properties using traditional ceramic preparation methods [4-10, 11]. The problems to be addressed are the high volatilization of potassium (K) and sodium (Na) during the preparation process as well as the obtainment of high density ceramics. The influence of La and Ti doping on the properties of KNN was previously investigated [12]. In this work, ceramic samples of KNN simultaneously doped with La and Ta, were successfully synthesized by two variants of the traditional ceramic method: in the first, the sintering stage was done in a crucible open to the air and in the second in a sealed crucible embedded in powder of the same composition to compensate volatilization losses. Structural, morphologic,

dielectric, and piezoelectric characterization was performed on the resulting samples.

EXPERIMENTAL

La doped ($K_{0.5}Na_{0.5}Nb_{0.9}Ta_{0.1}O_3$ (KNNTa) ceramics with composition ($K_{0.5}Na_{0.5}La_{0.0166}Nb_{0.9}Ta_{0.1}O_3$ (KNNTaLa) were prepared using the solid state synthesis technique. Raw material powders of K_2CO_3 (99.0 %, FagaLab), Na_2CO_3 (99.0 %, FagaLab), La_2O_3 (99.99 %, metal basis, Alfa Aesar), Nb_2O_5 (99.9 %, metal basis, Alfa Aesar) and Ta_2O_5 (99.8 %, metal basis, Alfa Aesar) were used as starting reactants. The powders were ground and mixed by magnetic agitation in alcohol at 400 rpm for 24 h, calcined at 800 °C for 5 h and ground again. This process was carried out twice. Cylindrical pellets, 11 mm diameter and 1 mm thick were then fabricated by uniaxial pressing the powders at 3 Ton/cm² sintering them at temperatures between 1150 °C and 1180 °C looking for the optimum temperature. Half of the samples were sintered in open air (labeled A) and the other half were encapsulated in their own atmosphere (labeled E). The sample density was measured by Archimedes technique. Phase composition was determined by X-ray diffraction (XRD) using a Philips X'pert diffractometer with $K\alpha Cu$ radiation. Morphology and microstructural features were determined with a JEOL JSM 5300 Scanning Electron Microscope (SEM).

Silver electrodes were thermally diffused onto the samples flat surfaces for electrical characterization. Relative permittivity and dielectric loss were evaluated in a custom made measuring stage using an HP 4284A LCR bridge. The samples were heated at a 1 °C/min rate under 1 V applied voltage and the measurements were taken in the 100 Hz to 1 MHz frequency range in a 25-450 °C temperature interval controlled within ± 1 °C. The electromechanical parameters k_p , d_{31} , s_{11} , in samples poled at 1 kV/mm at 90 °C in dielectric oil were determined by the resonance method using a spectrum analyzer built according to IEEE standards for piezoelectric materials and the expressions for k_p , d_{31} , s_{11} from [13].

RESULTS AND DISCUSSION

The optimal sintering temperature for KNNTaLa was found to be 1170-1180 °C using the measured density as the main criterion, among others. The idea was to get as close to the theoretical density as possible.

In Table I the sintering temperatures and corresponding experimental densities, as well as the density percentage with respect to the theoretical density value obtained from the XRD measurements are displayed. Encapsulation in the sintering process of the samples performed at practically the same temperature (a 10 °C difference) produces an important change in the density from 92 for A to 97 % for E, for samples of similar composition, obtained by the two sintering methods. In our case, the density of E samples is higher than that reported for the $KNNTa_{0.05}La_{0.015}$ [14]. A density of about 97% of the

theoretical value (the amount of the second phase could not be taken into account in the calculation), as calculated from the lattice parameters of the majority phase obtained from XRD is obtained for the encapsulated samples and it is shown in Table I.

Sample	T_s (°C)	ρ (g/cm ³)	$\epsilon_{max}/5kHz$	$T_{and}/5kHz$	T_{c-1} (°C)	T_c (°C)
E	1180	4.72 97%	1990	0.070	150	317
A	1170	4.51 92%	1365	0.075	150	314

Fig. 1 shows the XDR pattern taken from a cylindrical-disk-shaped E sample sintered at 1180 °C. The reflections of a majority phase and those of a second phase marked with an asterisk (*) are observed and are identified with a tungsten-bronze structure, belonging to $KLi_3Nb_5O_{15}$ (PDF 030122 ICDD) and $K_3Li_2Ta_5O_{15}$ (PDF 0400349 ICDD) according to [15, 16]. The lattice parameters of both phases were determined by least square fitting using the FullProf software. From the refinement process, using an orthorhombic structure belonging to $Bmm2$ space group for the majority phase and tungsten-bronze structures belonging to the $P4bm$ space group, the lattice parameters $a = 5.629$ Å, $b = 3.945$ Å, and $c = 5.606$ Å were determined for the majority phase and $a=12.554$ Å y $c=5.098$ Å for the secondary phase. According to [15], this secondary phase is formed when the K/Nb is modified. The parameters of the majority phase are slightly smaller than those of KNNTa, a result that may be interpreted as evidence of the incorporation of the lanthanum cation into the crystalline structure of KNNTa, given that the La ion is similar in size to the Na ion but considerably smaller than the K ion. The presence of a secondary phase also found by D. Lin et al. [16] and N. Klein et al. [9] is marked in the profile in Fig. 1.

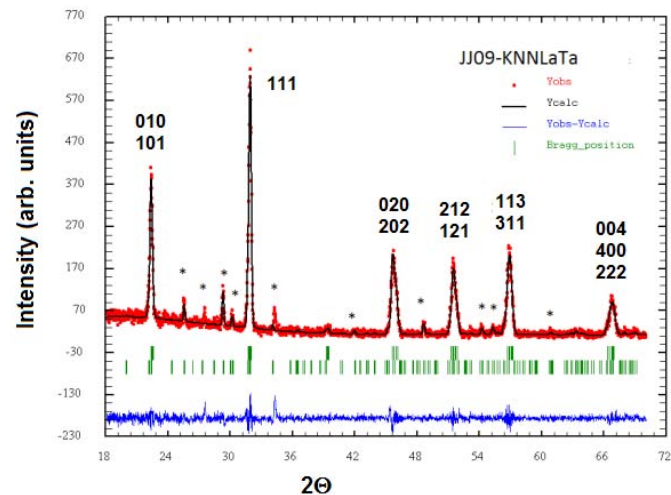


Figure 1: Experimental (points) and calculated (by least squares method, continuous line) XRD patterns of the of the KNNTaLa sample sintered at 1180°C; the difference between patterns is shown at the bottom. Bragg positions are shown with dashed vertical.

The XRD pattern of the A sample is similar in all aspects to the XRD pattern of the E sample showing that the structure of the KNNTaLa does not change with the sintering method, therefore, it is omitted.

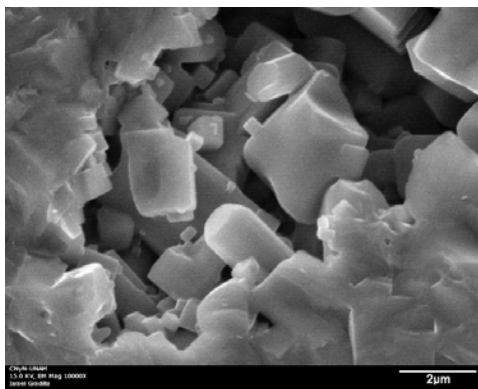


Figure 2: SEM micrograph of a KNNTaLa encapsulated sample, sintered at 1180 °C.

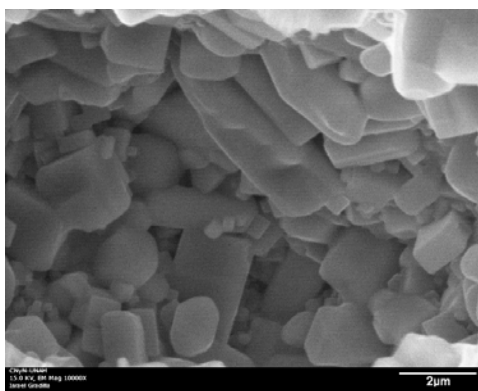


Figure 3: SEM micrograph of KNNTaLa sample sintered at 1170 °C in air.

Figures 2 and 3 show the scanning electron microscope (SEM) micrographs of A and E KNNTaLa ceramic samples sintered in air at 1170 °C and 1180 °C, respectively. The micrographs were taken from fractured samples.

The statistically determined average grain size was 0.7 μm for the E and 0.9 μm for the A samples. Even though the grain sizes are somewhat similar, the morphology is slightly different in that the edges in the A samples are not as sharp. Both types of samples look dense with small porosity, consistent with the density measurements.

For KNNTaLa the O-T transition takes place at around 150°C as reported by other authors [14]. The T-C transition for KNNTa_{0.5}La_{0.015} is reported in [14] at 249 °C while for KNNTaLa it occurs at 314 °C for E and 317 °C for A samples. The O-T and T-C transition temperatures shift to lower temperatures with respect those of KNNTa (T_C = 361 °C and T_{O-T} = 187°C [16]), making evident the incorporation of the La ions into the structure. A broadening of the transition curves with respect to those of the KNNTa compound is observed [14]; it is due to the La ions sharing the A site with those of K and Na and also to the effect of the above mentioned secondary phase which is ferroelectric with a T_C around 100 °C influencing the permittivity vs. temperature behavior in both E and A samples.

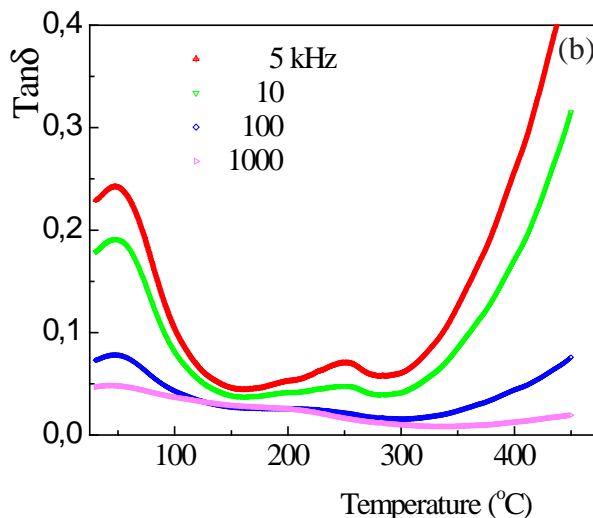
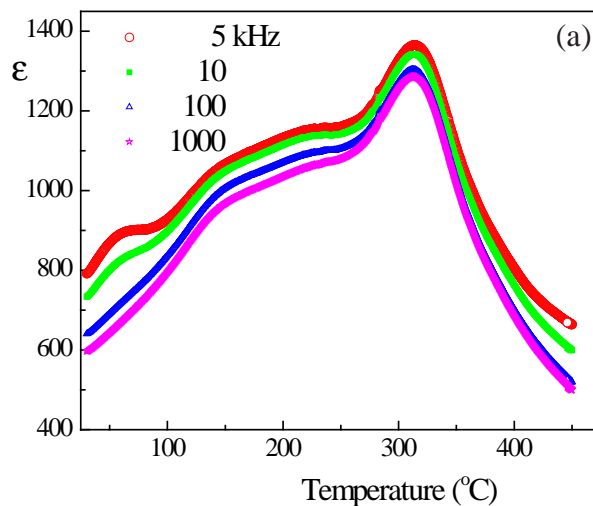


Figure 4: Temperature dependence of (a) the relative permittivity and (b) dielectric loss, at 5,10,100,1000 kHz for KNNTaLa sample sintered at 1170 °C.

The peak values of the relative dielectric permittivity for the encapsulated (E) samples are similar to those reported in [14]. This values decrease when the samples are sintered in open air giving us an indication of the sensitivity of the sample's properties with the sintering conditions. By encapsulating the sample in an atmosphere with the same composition as the sample, a better thermodynamical equilibrium is achieved, the loss of Na and K by volatilization is drastically reduced and the K/Na ratio deviates very little from 1. As a consequence, a reduction of the dielectric loss is observed for the encapsulated samples as compared with those prepared in open air. By comparing Figures 4b and 5b it is clearly shown that the samples sintered in air present higher losses that may be attributed to higher conductivity.

However, a significant feature is the fact that for the T-C transition there is no shift of the permittivity maxima with frequency, showing that the tetragonal to cubic is a normal transition and not a relaxor behavior.

The incorporation of La renders a more disordered material where three ions randomly share the same crystallographic

A site of the perovskite smoothening and broadening the O-T and T-C transitions. As is well known, the addition of lanthanum to the composition of many lead free ferroelectric compounds has the effect of shifting the transition temperature to lower values and also of decreasing the values of the relative permittivity maximum [17]. When we compare the relative permittivity vs. temperature curves for the E and A samples it is clearly observed that higher values of ϵ and lower of $\tan\delta$ are obtained for the encapsulated samples suggesting that the prevention of the losses of K and Na due to their volatility produces samples with better dielectric properties. The secondary phase is ferroelectric with T_c around 100 °C [14] causing the observed anomalies in the permittivity and dielectric losses vs. temperature curves at low temperature.

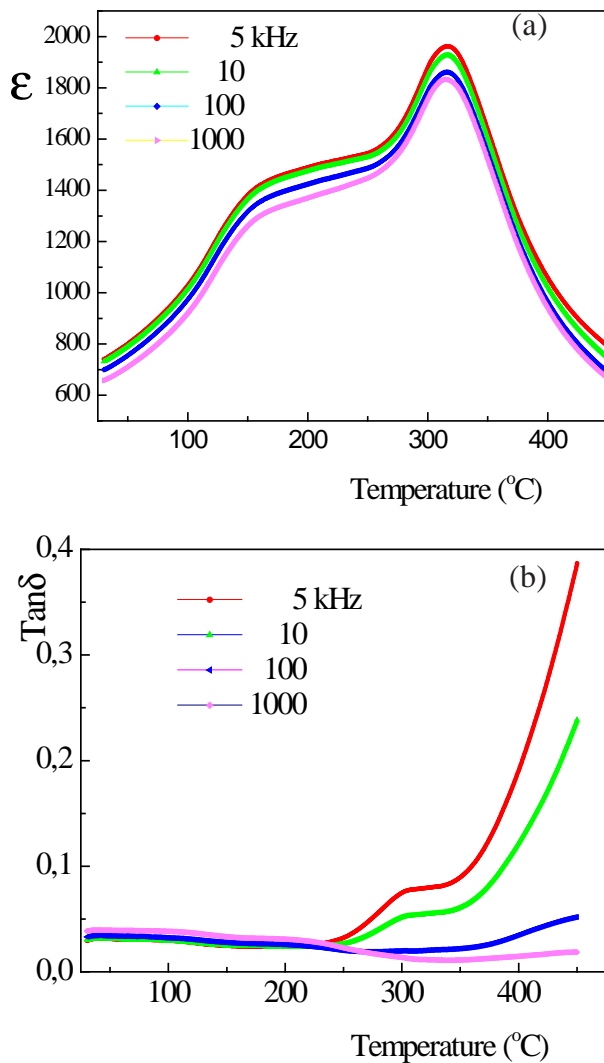


Figure 5: Temperature dependence of (a) the relative permittivity and (b) dielectric loss, at 5, 10, 100, 1000 kHz for KNN-TaLa sample sintered at 1180 °C.

Fig. 6 shows the electromechanical response obtained by means of the impedance modulus $Z(\Omega)$ vs. frequency measurements for the E and A samples, under the same geometric conditions, poled at 1 kV/mm based on the expressions in [13,18]. It is observed from the graph in Fig. 6 that the value of $\Delta Z = Z_{\max} - Z_{\min}$, corresponding to the electromechanical resonance region, is larger for the E sample than for the A sample (see

inset in Fig.6). This is a consequence of a higher polarization achieved in the encapsulated samples as compared with the samples sintered in air, for the same poling field.

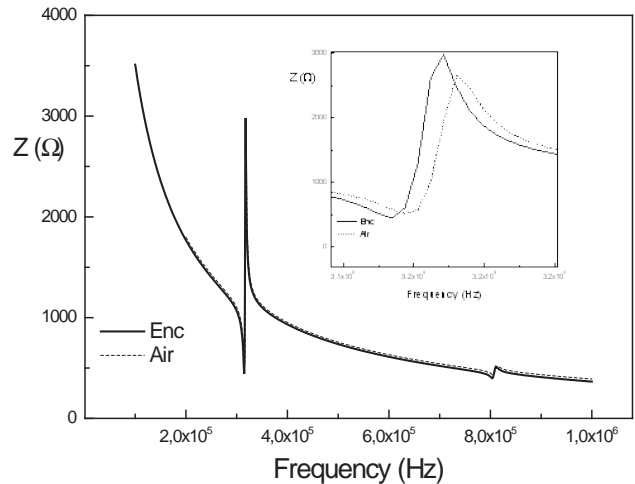


Figure 6: Impedance vs. Frequency of samples KNN-TaLa sintered in open air and encapsulated

Table II presents the experimental values of the electromechanical parameters. It can be observed that the difference in the values of k_p for the samples prepared in open air and the encapsulated samples is not significant. Those values, however, are reasonable good taking into account the low poling field (1 kV/mm) used for these samples in contrast to the higher one of 4 kV/mm used by other authors [14]. When comparing the values of the electromechanical parameters obtained in this work with those reported for commercial PZT ceramics [19] it can be concluded that La, Ta doped KNN has good potential for future electromechanical applications.

Sample	k_p	k_{31}	σ	$S_{11} \cdot 10^{-12}$ (m ² /N)	d_{31} pC/n
E	0.153	0.10	0.042	10	-6.46
A	0.148	0.10	0.077	7	
PZ45[19]	0.030	----	0.250	8	-1.70
PZA5[19]	0,080	----	0.200	22	-11.5

CONCLUSIONS

An optimized route for the obtainment of high density (97 % of the theoretical value) La modified KNN-Ta ceramics is presented. A strong influence of the sintering conditions is acknowledged where the encapsulation of the reactants to prevent K and Na losses by volatilization is a key step in the sintering process. The improvement due to the preparation method is made evident by comparing with the values obtained for samples sintered in open air. However both samples had the same orthorhombic perovskite structure. Traces of a secondary phase were identified and their lattice parameters were determined. It was found that La substitution influences the phase transitions (orthorhombic to tetragonal and tetragonal

to cubic) of KNN-TaLa by shifting the critical temperatures toward lower values. An improvement is reported with respect to the results published by other authors [14]. In summary, the studied composition together with the proposed preparation technique provides an alternative to commercial ceramics as piezoelectric materials.

This work was supported by “Programa México-Centro América y el Caribe para el Avance de la Ciencia, la Tecnología y la Innovación, CONACYT-ICTP-SMF”, also by PAPIIT-UNAM 107312, DGAPA-UNAM IN106414, IN113312, IN107708, and IN112610, and CONACYT 166286, 174392, 127633 and 101020 projects. C. Ostos thanks the ICyTDF-CLAF for the postdoctoral fellowship. Thanks are also due to E. Aparicio, and I. Gradilla for their technical assistance.

[1] B. Jaffe, W. R. Cook Jr, and H. Jaffe, *Piezoelectric Ceramics*, (Academic Press, New York, 1971).
[2] Y. Xu, *Ferroelectric Materials and Their Applications*, (North-Holland, Amsterdam, 1991).
[3] M. E. Lines and A. M. Glass, *Principles and Applications of Ferroelectrics and Related Materials*, (Clarendon, Oxford, 1977).
[4] Y. Zhen, J. F. Li, J. Am. Ceram. Soc. **89**, 3669 (2006).
[5] B. Malic, J. Bernard, J. Holc, D. Jenko, M. Kosec, J. of European Ceram. Society **25**, 2707 (2005).
[6] M. D. Maeder, D. Damjanovic and N. Setter, Journal of

Electroceramics **13**, 385 (2004).
[7] K. X. Chen, G. Xu, D. Yang, X. Wang, J. App. Phys. **101**, 044103 (2007).
[8] Y. Saito, H. Takao, T. Tani, T. Nonoyama, K. Takatori, T. Homma, T. Nagaya and M. Nakamura, NATURE (London) **432**, 84 (2004).
[9] N. Klein, E. Hollenstein, D. Damjanovic, H. J. Trodahl, N. Setter, and M. Kuball, J. Appl. Phys. **102**, 014112 (2007).
[10] S. Zhang, R. Xia, and T. Shrout, Appl. Phys. Lett. **91**, 132913 (2007).
[11] M. Demartin-Maeder, D. Damjanovic, N. Setter, Journal of Electroceramics, **13**, 385 (2004).
[12] J. Fuentes, J. Portelles, A. Pérez, M. D. Durruthy-Rodríguez, C. Ostos, O. Raymond, J. Heiras, M. P. Cruz and J. M. Siqueiros, Appl. Phys. A **107**, 733 (2012).
[13] ANSI/IEEE Standard on Piezoelectricity, Std. 176-1987, (IEEE, New York, 1988).
[14] J. Hao, Zhijun Xu, Ruiqing Chu, Wei Li, Guorong Li, Qingrui Yin, Journal of Alloys and Compounds **484**, 233 (2009).
[15] E. A. Giess, B. A. Scott, G. Burns, D. F. O’Kane, and A. Segmuller, Journal of The American Ceramic Society, **52**, 276 (1969).
[16] D. Lin, K. W. Kwok and H. L. W. Chan, J. Appl. Phys. **102**, 034102 (2007).
[17] J. Portelles, I. González, A. Kiriev, F. Calderón, S. Garcia, N. Calzada, J. Materials Science Letters **12**, 1871 (1993).
[18] H. Meitzler, H. M. O’ Bryan, Jr., H.F. Tiersten, IEEE. Trans. Sonics. Ultrason. S.U-**20**, 233 (1973).
[19] T. L. Jordan and Z. Ounaies, *Piezoelectric Ceramics Characterization* (NASA/CR-2001-211225, ICASE Report No. 2001-28).

ON THE PHOTOSYNTHETIC POTENTIAL IN THE OPEN OCEANS

SOBRE EL POTENCIAL FOTOSINTÉTICO EN EL OCÉANO MUNDIAL

L. RODRÍGUEZ,^{a,†} R. CÁRDENAS^{a,†} Y D. ÁVILA-ALONSO^{b,*}

a) Faculty of Mathematics, Physics and Computing Science, Universidad Central "Marta Abreu" de Las Villas, Cuba. lrlopez@uclv.edu.cu, † rcardenas@uclv.edu.cu. †

b) Industrial Fishing Enterprise of Ciego de Avila, Cuba. davila@uclv.cu*

† corresponding author

(Recibido 27/11/2013; Aceptado 17/5/2014)

The photosynthetic potential of the main primary producers in open oceans (phytoplankton) is quantitatively assessed using Jerlov's optical classification for ocean waters. To consider more accurately the inhibitory effect of ultraviolet radiation on photosynthesis, two biological weighting functions were used, one for equatorial and tropical phytoplankton, and the other for the subarctic one. Results show similar photosynthetic potentials in equatorial and tropical regions, and smaller photosynthesis rates for the subarctic zones. On the other hand, for the same latitude, there were considerable differences in the photosynthetic potential between the clearest open ocean waters (optical type I) and the darkest (optical type III), being around five times greater in the clearest open ocean waters.

Se estima cuantitativamente el potencial fotosintético de los principales productores primarios (fitoplancton) en las cuencas oceánicas, utilizando la clasificación óptica de Jerlov para las aguas oceánicas. Para considerar con mayor exactitud el efecto inhibitorio de la radiación ultravioleta sobre la fotosíntesis, se usaron dos espectros de acción biológica, uno para el fitoplancton ecuatorial y tropical, y el otro para el subártico. Los resultados muestran similares potenciales fotosintéticos para las regiones ecuatorial y tropical, y menor para las subárticas. Por otro lado, para la misma latitud, hubo considerable diferencias de potencial fotosintético entre las aguas más claras (tipo óptico I) y las más oscuras (tipo óptico III), en todos los casos el potencial fue alrededor de cinco veces mayor en las aguas más claras.

PACS: General theory of biological physics, 87.10.-e; Ocean optics, 42.68.Xy; Photosynthesis in oceanography, 92.20.Cm, *92.20.ch.

INTRODUCTION

Photosynthesis is the most basic process of Earth's biosphere. It transforms the energy of (solar) electromagnetic radiation in the approximate wavelength range 400–700 nm (photosynthetically active radiation, PAR) into biochemical energy. On the other hand, this process is inhibited by (solar) ultraviolet radiation (UVR). Therefore, in open oceans the maximum potential for photosynthesis in general is achieved at depths where the compromise UVR–PAR has some sort of optimum: where UVR has been sufficiently attenuated by water absorption and scattering, while still important amounts of PAR get there. This is the result of a stronger attenuation of UVR in ocean water (as compared to PAR).

In this work we use an optical classification of ocean water to assess, in a generic way, the potential for the photosynthesis of phytoplankton in the open oceans of our planet. Photosynthesis by phytoplankton cells in aquatic environments contributes to more than 40% of the global primary production [1]. Being phytoplankton the starting points in aquatic food assemblages, it is crucial to quantitatively assess the photosynthesis potential of ocean waters. Phytoplankton also has an important role in the regulation of climate in our planet, as it absorbs considerable amounts of carbon dioxide (a greenhouse gas) and releases oxygen to the biosphere.

MATERIALS AND METHODS

The solar radiation To make the quantitative assessment on the role of UVR on ocean phytoplankton productivity, we quantify the photosynthetic potential for phytoplankton for three representative (proxy) latitudes: equatorial (0°), tropical (30°) and subarctic (60°). Annual average solar spectral irradiances at these latitudes for photosynthetically active radiation (400–700 nm) and inhibitory ultraviolet radiation (280–400 nm) were used. In all cases cloudless skies were assumed.

The oceanic radiative transfer model It was used Jerlov's optical ocean water classification [2], selecting the ocean water types I and III (clearest and darkest).

The spectral irradiances just below sea surface ($z = 0^-$) were obtained from the corresponding ones just above sea surface ($z = 0^+$) through

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

where R is the reflection coefficient obtained from Fresnel formulae applied to the interface air-water. The spectral irradiances $E(\lambda, z)$ at depth z were calculated using Lambert-Beer's law of Optics:

$$E(\lambda, z) = E(\lambda, 0^-) \exp[-K(\lambda)z] \quad (2)$$

$K(\lambda)$ stands for the attenuation coefficient for wavelength. The set of attenuation coefficients define the optical type of ocean water. In [2] they are reported for given wavelengths, typically separated by intervals of 25 nm. For previous works some of us made a linear interpolation to have the coefficients for each wavelength in the full range 280 – 700 nm [3].

The irradiances of photosynthetically active radiation were calculated by

$$E_{PAR}(z) = \sum_{400nm}^{700nm} E(\lambda, z) \Delta\lambda, \quad (3)$$

while those for ultraviolet radiation were weighted with a biological weighting function (BWF) $\varepsilon(\lambda)$ which gives more weight to more inhibitory wavelengths

$$E_{UVR}^*(z) = \sum_{222nm}^{399nm} \varepsilon(\lambda) E(\lambda, z) \Delta\lambda. \quad (4)$$

In equations (3) and (4), $\Delta\lambda = 1$ nm. To consider more accurately the inhibitory effect of UVR on photosynthesis we used two biological weighting functions (BWF) $\varepsilon(\lambda)$: one for temperate and other for Antarctic phytoplankton. These BWF's which account for both DNA damage and photosystem inhibition, resulting in whole-cell phytoplankton photosynthesis inhibition. The BWF for temperate phytoplankton was used to calculate the photosynthesis rate in equatorial and tropical zones, while the other was used for subarctic regions.

The photosynthesis model To compute the photosynthesis rates P at depth z (normalised to saturation rates P_s), we use a model for photosynthesis, typically employed with phytoplankton assemblages with good repair capabilities of solar UVR damage [4]

$$\frac{P}{P_s}(z) = \frac{1 - \exp[-E_{PAR}(z)/E_s]}{1 + E_{UV}^*(z)}, \quad (5)$$

where E_{PAR} and E_{UV} are the irradiances of photosynthetically active radiation and ultraviolet radiation at depth z . The parameter E_s accounts for the efficiency with which the species uses PAR: the smaller its value, the greater the efficiency. The asterisk in E_{UV} means that spectral irradiances of UVR are weighted with a biological weighting function $\varepsilon(\lambda)$.

The average photosynthesis rate $\langle P/P_s \rangle$ in the first 200 meters of the oceanic water column was calculated splitting it into N layers. Then, the photosynthesis rate $P/P_s(n)$ inside the n -th layer was calculated. The average photosynthesis rate was then given by

$$\left\langle \frac{P}{P_s} \right\rangle = \frac{\sum_{n=1}^N \frac{P}{P_s}(n)}{N}. \quad (6)$$

RESULTS AND DISCUSSION

Figures 1–3 show the photosynthetic rates for optical ocean water type I (clearest).

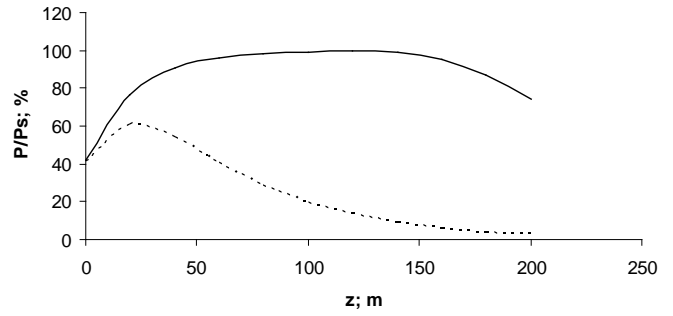


Figure 1. Photosynthesis rates in ocean water type I in equatorial regions. Solid and dashed curves represent, respectively, high ($E_s = 2$ W/m²) and low ($E_s = 100$ W/m²) efficiency of phytoplankton in the use of PAR.

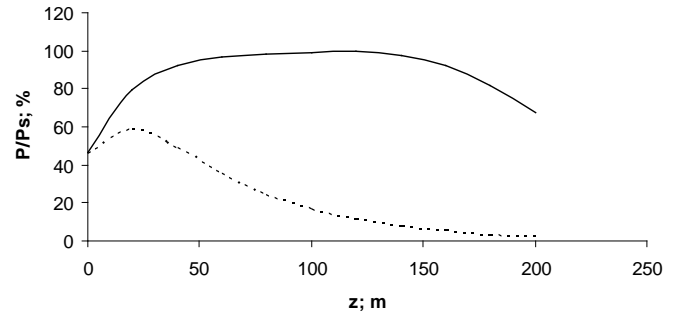


Figure 2. Photosynthesis rates in ocean water type I in tropical regions. Solid and dashed curves represent, respectively, high ($E_s = 2$ W/m²) and low ($E_s = 100$ W/m²) efficiency of phytoplankton in the use of PAR.

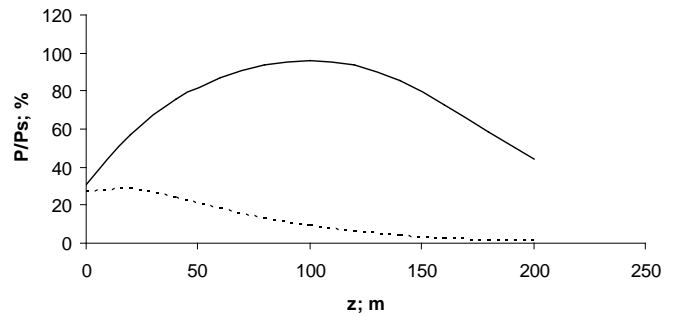


Figure 3. Photosynthesis rates in ocean water type I in subarctic regions. Solid and dashed curves represent, respectively, high ($E_s = 2$ W/m²) and low ($E_s = 100$ W/m²) efficiency of phytoplankton in the use of PAR.

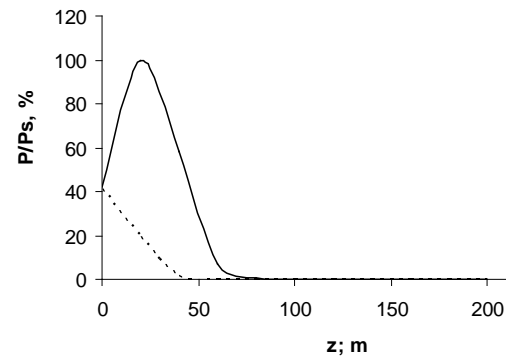


Figure 4. Photosynthesis rates in ocean water type III in equatorial regions. Solid and dashed curves represent, respectively, high ($E_s = 2$ W/m²) and low ($E_s = 100$ W/m²) efficiency of phytoplankton in the use of PAR.

Figures 4–6 show the photosynthetic rates for optical ocean water type III (darkest).

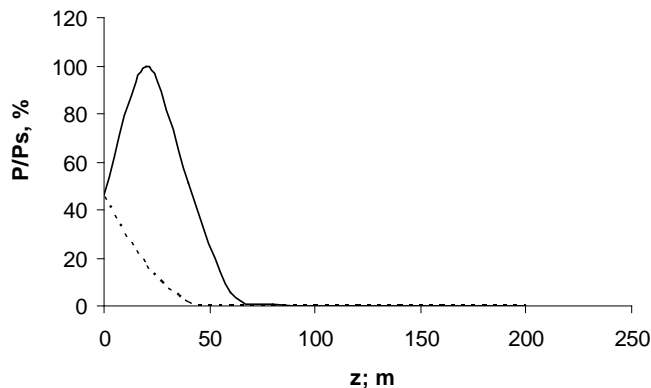


Figure 5. Photosynthesis rates in ocean water type III in tropical regions. Solid and dashed curves represent, respectively, high ($E_s = 2 \text{ W/m}^2$) and low ($E_s = 100 \text{ W/m}^2$) efficiency of phytoplankton in the use of PAR.

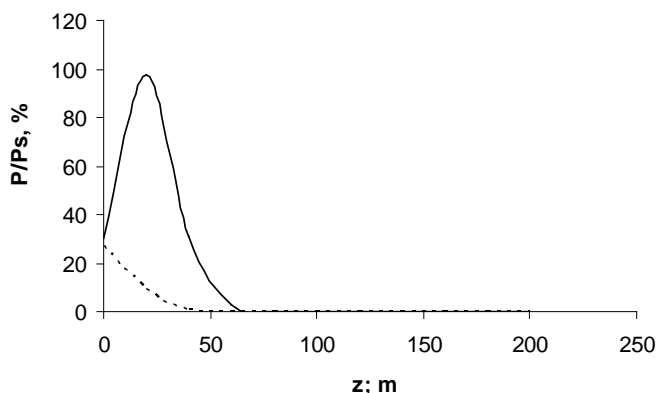


Figure 6. Photosynthesis rates in ocean water type III in subarctic regions. Solid and dashed curves represent, respectively, high ($E_s = 2 \text{ W/m}^2$) and low ($E_s = 100 \text{ W/m}^2$) efficiency of phytoplankton in the use of PAR.

From a visual inspection of Figures 1–6, we see similar photosynthesis rates for equatorial and tropical regions. This can be explained because a more intense PAR in the Equator is accompanied by a more intense (inhibitory) UVR. In subarctic regions, the relatively low intensity of PAR determines a lower photosynthetic potential. This pattern is better seen after the application of equation (6) to obtain average photosynthetic rates in the first 200 meters of the ocean. Table 1 shows remarkable similar photosynthetic potential for equatorial and tropical regions, in the two extremes of optical ocean water (clearest and darkest) and for the two extremes of phytoplankton efficiency in the use of PAR (given by the parameter E_s).

Region	Water Type I		Water Type III	
	$E_s = 2 \text{ W/m}^2$	$E_s = 100 \text{ W/m}^2$	$E_s = 2 \text{ W/m}^2$	$E_s = 100 \text{ W/m}^2$
Equatorial	90	25	19	4.3
Tropical	89	23	18	4.1
Subarctic	76	12	15	2.3

As expected, in all cases species highly efficient in the use of PAR ($E_s = 2 \text{ W/m}^2$) would have much higher photosynthetic rates than the very low efficient species ($E_s = 100 \text{ W/m}^2$). Additionally, highly efficient species do not change their potential much when latitude changes, which would keep good

biological primary productivity in subarctic ocean regions, provided nutrients are available.

Region	P_I/P_{III}	
	$E_s = 2 \text{ W/m}^2$	$E_s = 100 \text{ W/m}^2$
Tropical	4.9	5.6
Subarctic	5.1	5.2
Equatorial	4.7	5.8

On the other hand, for the same latitude, there were enormous differences in the photosynthetic potential between the clearest ocean waters and the darkest ones. This is clearly seen in Table 2, where relative photosynthetic potentials are shown: in all cases the photosynthetic potential for the clearest ocean waters is around five times greater than the potentials in the darkest waters.

CONCLUSIONS

Our generic quantitative assessment of the potential for phytoplankton photosynthesis in Earth's open oceans shows that type I (clearest) ocean optical waters have a photosynthetic potential around five times greater than type III (darkest) ocean waters. Another interesting fact is that equatorial and tropical regions show quite similar potentials, caused by a similar balance PAR–UVR. This first modeling of planetary aquatic primary productivity considered only light (PAR and UVR). In the future, we shall address this issue from a more general point of view, introducing another variables such nutrients and temperature, and in general more elements of Quantitative Habitability Theory [5].

- [1] M. J. Behrenfeld, R. T O'Malley, D. A. Siegel, C. R. McClain, J. L. Sarmiento, G. C. Feldman, A. J. Milligan, P. G. Falkowski, R. M. Letelier and E. S. Boss, *Nature* **444**, 752 (2006).
- [2] N. G. Jerlov, *Marine Optics* (Elsevier, Amsterdam, 1976).
- [3] L. Peñate, O. Martín, R. Cárdenas, and S. Agustí, *Astrophys Space Sci* **330**, 211 (2010).
- [4] J. J. Fritz, P. J. Neale, R. F. Davis and J. A. Peloquin, *Mar Ecol Prog Ser* **365**, 1 (2008).
- [5] A. Mendez, *Evolution of the global terrestrial habitability during the last century* [Proceedings of NASA's Astrobiology Science Conference] (2010) (www.lpi.usra.edu/meetings/abscicon2010/pdf/5483.pdf).

SISTEMA DIGITAL INVARIANTE A POSICIÓN Y ROTACIÓN PARA EL RECONOCIMIENTO DE OBJETOS EN IMÁGENES MEDIANTE PERFILES DE INTENSIDAD*

DIGITAL SYSTEM INVARIANT TO POSITION AND ROTATION TO OBJECT RECOGNITION IN IMAGES BY INTENSITY PROFILES*

S. SOLORZA^{a†} AND J. ÁLVAREZ-BORREGO^b

a) Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Baja California, México; selene.solorza@gmail.com[†]

b) Depto. de Óptica, Div. Física Aplicada, CICESE, México. josue@cicese.mx

[†] autor para la correspondencia

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

Se presenta un sistema digital invariante a traslación y rotación para la identificación de imágenes de diatomeas, que es sencillo y eficiente. El sistema utiliza el módulo de la transformada de Fourier de la imagen, perfiles de intensidad y la correlación estándar entre los perfiles de intensidad de la imagen de referencia y los de la imagen problema (imagen a identificar). Al probar el sistema con un conjunto de ocho imágenes en escala de grises de diatomeas similares entre sí, el nivel de confianza del sistema es de al menos 95.4%.

A simple and efficient translational and rotational invariant digital system to classify diatoms image is presented. The system uses the modulus of the Fourier transform, intensity profiles and the standard correlation between the intensity profiles of the target and the image problem (image to identify). The system was analyzed using a set of eight similar images in gray-scale of diatoms; the confidence level of the system is at least 100%.

PAQS: Image processing algorithms, 07.05.Pj; Computational techniques mathematics, 02.70.-c; Computer science and technology, 89.20.Ff; Computers laboratory use, 01.50.Lc.

INTRODUCCIÓN

Desde el inicio de la vida, los hombres se han dedicado al reconocimiento de objetos, ya sea por necesidad o sólo por la curiosidad de clasificar los objetos de su alrededor. Hoy en día con casi todos los procesos de producción automatizados y el rápido avance de la tecnología, la exigencia en la mejora de los sistemas de reconocimiento de patrones es cada vez mayor [1].

Los sistemas digitales invariantes a posición y rotación son una herramienta muy útil para identificar micro y macro estructuras en imágenes digitales. Tales sistemas se han utilizado ampliamente en las áreas de las ciencias naturales [2,3].

El sistema digital que se presenta clasifica imágenes de diatomeas independientemente de la traslación y el ángulo en que se presenten. Las diatomeas son una de las fuentes básicas para la formación de materia orgánica en el océano y participan activamente en la sedimentación. La presencia de diatomeas en paleoambientes marinos ha sido usada para el estudio de cambios climáticos y de procesos geomorfológicos [4,5]. La identificación de fósiles de diatomeas requiere el análisis generalmente de entre 400 a 10^7 estructuras por gramo.

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

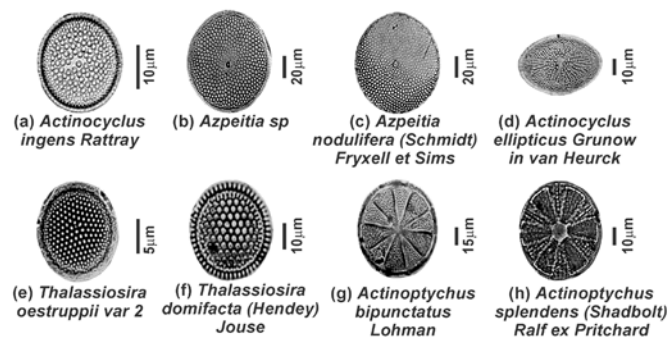


Figura 1. Diatomeas.

PERFIL DE INTENSIDAD

Sea $\beta = \{I_a, I_b, I_c, \dots, I_k, \dots, I_m\}$ el conjunto de imágenes de referencia de la Figura 1, donde I_k indica la imagen k -ésima de la Figura 1, $k = a, b, \dots, m$. Dichas imágenes están en escala de grises y son de tamaño $n \times n$, con $n = 256$. Para obtener la invariancia a traslación utilizamos el espectro de amplitud de Fourier de la imagen, entonces la imagen a utilizar en el sistema es $G_k(x, y) = |FT(I_k(x, y))|$, $x, y \in \{1, 2, \dots, n\}$.

Sea el pixel (c, c) el centro de la imagen, al hacer corresponder el origen del plano cartesiano con (c, c) calculamos cuatro rectas

o perfiles $P^\theta(q+129) = \{G_k(q \cos \theta, q \sin \theta) : -128 \leq q \leq 128\}$, que pasan por el origen, el superíndice θ indica el ángulo que forma la recta P^θ con el eje horizontal, $\theta = 0, 45, 90, 135$.

Para que que todos los perfiles tengan la misma longitud n , a la imagen G_k la filtramos con la siguiente máscara binaria de tamaño $n \times n$,

$$D(x, y) = \begin{cases} 1, & \text{si } d((c, c), (x, y)) \leq n, \\ 0, & \text{en otro caso,} \end{cases} \quad (1)$$

donde $d(p, q)$ es la distancia euclidiana entre dos puntos. Así que, el espectro con el que trabajamos es

$$H_k = G_k * D, \quad (2)$$

donde la operación representada por "*" es una multiplicación punto a punto. En la Figura 2 se muestra H_a correspondiente a I_a y sus cuatro perfiles asociados se indican en línea continua (P_a^0), en discontinua (P_a^{45}), en punteada (P_a^{90}) y en guión-punto (P_a^{135}).

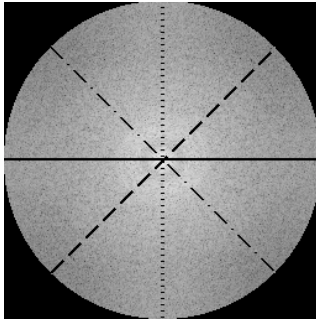


Figura 2. H_a de I_a y sus perfiles asociados. Por propósitos de visualización se muestra el logaritmo de la imagen.

SISTEMA DIGITAL INVARIANTE A TRASLACIÓN Y ROTACIÓN

Sea $\gamma = \{IP_\alpha^j : j = a, b, \dots, m; \alpha = 0, 1, 2, \dots, 359\}$ el conjunto de imágenes a reconocer o imágenes problema (IP). El superíndice indica la imagen tomada de la Figura 1 y el subíndice el ángulo al que se rotó dicha imagen. Entonces, el conjunto γ contiene 2,880 elementos a clasificar.

Vamos a definir a lo que llamaremos la firma escalar de la imagen de referencia I_k del conjunto. Primeramente, a dicha imagen le asociamos sus cuatro perfiles (P_a^0), (P_a^{45}), (P_a^{90}) y (P_a^{135}) (como se vio en la sección anterior). Calculamos la autocorrelación clásica para cada uno de esos perfiles de intensidades, esto es

$$C(P_k^\theta, P_k^\theta) = \sum_{j=-(n-1)/2}^{(n-1)/2} P_k^\theta(j) P_k^\theta(\tau+j), \quad (3)$$

donde $\tau \in \mathbb{Z}$. Enseguida obtenemos $\zeta_k^\theta = \max(C(P_k^\theta, P_k^\theta))$, para finalmente, caracterizar a la imagen I_k por medio de su firma escalar

$$s_k = \sum_{\theta} \zeta_k^\theta / 4. \quad (4)$$

Para determinar si una imagen problema IP_j^α es igual a una

de las imágenes de referencia, primeramente obtenemos su espectro de amplitud (ec. 2) y lo llamamos $H_\alpha^{j,0}$. A esa imagen le asociaremos sus perfiles, etiquetados como $T_j^{\alpha,0}$. Posteriormente, mediante la ec. 3 calculamos $C(P_k^\theta, T_\alpha^{j,0})$, para luego obtener $\xi_{j,\alpha}^{0,\theta} = \max(C(P_k^\theta, T_\alpha^{j,0}))$. Por último, se determina a lo que nosotros hemos definido como la firma escalar $s_\alpha^{j,0}$ de $H_\alpha^{j,0}$,

$$s_\alpha^{j,0} = \sum_{\theta} \xi_{j,\alpha}^{0,\theta} / 4. \quad (5)$$

Supongamos que la imagen IP_j^α no está rotada y es igual a I_k , entonces H_k y $H_\alpha^{j,0}$ son iguales por lo que $s_k = s_\alpha^{j,0}$. Pero si IP_j^α es una rotación de I_k entonces s_k diferirá de $s_\alpha^{j,0}$. Para lograr la invariancia a rotación, la imagen $H_\alpha^{j,0}$ la rotamos solamente 180 grados por la simetría sobre el eje vertical, de grado en grado, para obtener 180 imágenes $H_\alpha^{j,\phi}$, donde ϕ representa el ángulo al que fue rotada. A cada una de esas $H_\alpha^{j,\phi}$ le asignamos su correspondiente firma escalar $s_\alpha^{j,\phi}$ (ec. 5). De esas firmas la que será igual o similar a s_k es la que provenga del ϕ que haga que $H_\alpha^{j,\phi}$ coincida con H_k , esto es:

$$s_\alpha^j = \max_{0 \leq \phi \leq 359} \{s_\alpha^{j,\phi}\}, \quad (6)$$

entonces, s_α^j es la firma escalar de la imagen IP_j^α . Para llevar a cabo la identificación, si el valor de la firma escalar de la imagen problema (ec. 6) coincide con el valor de la firma escalar de la imagen de referencia (ec. 4), entonces la imagen problema está contenida en la imagen de referencia, caso contrario es una imagen diferente.

RESULTADOS

Cada una de las imágenes de la Figura 1 fueron usadas como imágenes de referencia para clasificar las IP del conjunto γ . Al realizar el análisis estadístico usando diagramas de cajas con $\pm 2E$ (errores estándar) y analizando el comportamiento de valores extremos obtuvimos que el sistema digital tiene un nivel de confianza de al menos 95.4%.

CONCLUSIONES

Presentamos un sistema digital sencillo de implementar y eficiente en la clasificación de imágenes de diatomeas.

El trabajo fue parcialmente apoyado por los proyectos CONACyT No. 102007 y 169174.

- [1] R. C. Gonzalez, y R. E. Woods, *Digital image processing*, 2da Ed. (Prentice Hall, 2002), pp. 15-45.
- [2] J. Álvarez-Borrego, y M. C. Chávez-Sánchez, *Introducción a la identificación automática de organismos y estructuras microscópicas y macroscópicas* (Ediciones de la Noche, 2008).
- [3] S. Solorza, y Álvarez-Borrego, *Opt. Commun.* **283**, 19 (2010).
- [4] M. Hajós, *DSPP*, **5**, 35 (1976).
- [5] I. Koizumi y Y. Tanimura, *Initial Report DSDP*, 86 (1985).

LA FLUORESCENCIA EN EL DIAGNÓSTICO DEL TEJIDO DENTAL *

FLUORESCENCE IN THE DIAGNOSTIC OF DENTAL TISSUE*

E. PURÓN^{a†}, R. HOMS^b Y R. M. PAYÁ^c

a) Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales, Universidad de La Habana; epuron@imre.oc.uh.cu[†]

b) Departamento de Física, IPSJAE; rhoms@electronica.cujae.edu.cu

c) Instituto de Geofísica y Astronomía, IGA, rosamaria@iga.cu

[†] autor para la correspondencia

(Recibido 12/4/2012; Aceptado 20/4/2013)

Se describe el proceso experimental de obtención de la fluorescencia del tejido dental. Se procede a un análisis comparativo del comportamiento de la fluorescencia del tejido sano y del tejido cariado, y a la comparación de los resultados obtenidos con los descritos en la literatura. Dado que los métodos ópticos para detectar lesiones cariosas son menos invasivos se propone la fluorescencia inducida con LED azul como método futuro para la detección de la presencia de Streptococcus en la flora bacteriana bucal y así poder identificar caries incipientes en los servicios estomatológicos de nuestro país.

An experimental method for obtaining fluorescence of the dental tissue is described. A comparative analysis for the behavior of the tissue fluorescence, both, healthy or intact enamel and carious samples is presented; the comparison of the obtained results with the ones described in the literature is done. Optical methods for the detection of carious lesions have the advantage of being minimally invasive. For this reason, induced fluorescence with a blue light to detect the presence of the Streptococcus in the oral cavity is proposed as an identifier method for find initial caries in dentistry in our country.

PACS: Absorption spectroscopy in biophysics, 87.64.K-; Biological systems optical and infrared radiation effects, 87.50.W- , Light-emitting diodes, 85.60.Jb.

I. INTRODUCCIÓN

La caries dental, constituye un problema de salud bucal priorizado en el país, es una de las enfermedades de mayor prevalencia, afectando a más del 90% de la población. Se clasifica como una enfermedad transmisible e irreversible y según [1] es la enfermedad más común del ser humano. Se define como un proceso o enfermedad dinámica crónica, que ocurre en la estructura dentaria en contacto con los depósitos microbianos, debido al desequilibrio entre la sustancia dental y el fluido de placa circundante, se obtiene como resultado, una pérdida de mineral de la superficie dental, cuyo signo es la destrucción localizada de tejidos duros. En Cuba la tendencia de la enfermedad en la población menor de 15 años ha seguido un comportamiento similar al descrito para otros países.

A nivel internacional en odontología existen muy diversas maneras de enfrentar el diagnóstico, prevención y manejo de las lesiones cariosas. Sin embargo, en los últimos años se ha comenzado a aplicar nuevas técnicas diagnósticas que permiten practicar en cada paciente múltiples estudios que incrementan la posibilidad de detectar esta enfermedad, entre ellas está la fluorescencia infrarroja inducida por láser y la fluorescencia inducida por luz LED azul [2].

La fluorescencia es la emisión de una onda electromagnética

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

cuando la molécula pasa de un estado sencillo excitado a un estado sencillo basal, esquemáticamente:

$$S(\pi, \pi^*) \rightarrow S(\pi, \pi) + \text{fotón}$$

$S(\pi, \pi^*)$: estado sencillo excitado con un electrón π deslocalizado en un nivel energético superior al basal. $S(\pi, \pi)$: Estado sencillo basal.

Los tiempos de vida de la fluorescencia de la mayoría de las moléculas orgánicas están entre 10^{-9} y 10^{-6} s [3].

En [4] se demuestra que las bacterias del tipo Streptococcus relacionadas con la caries dental, al ser analizadas in vitro muestran un espectro de fluorescencia razonablemente similar al de las porfirinas, por lo que se concluye que el fluoróforo principal lo constituyen precisamente estas moléculas; por lo que investigaciones explorando vías de diagnóstico más eficientes, encaminadas a la prevención de la patología en cuestión, han girado sus enfoque hacia la fluorescencia de las porfirinas en la cavidad intraoral. Las porfirinas pueden ser excitadas eficientemente en la llamada "Soret band" alrededor de los 400 nm y con menor eficiencia en 4 "Q-bands" que tienen su máximo entre los 500 y 630 nm teniendo en cuenta que las longitudes de onda de emisión por fluorescencia son mayores que las del espectro de absorción de la propia molécula.

II. DESARROLLO

Material y método Para la obtención de la respuesta

fluorescente, se empleó el fluorómetro Shimadzu Spectrofluoro Photometer RF-5301PC. Se analizó una muestra de diente cariado, recién extraído, sometido a una limpieza a profundidad con una disolución conocida como Jugos Gástricos [5] que elimina toda sangre adherida al mismo. El diente tratado se reduce a polvo y se disuelve en solución acuosa. Se utiliza para la excitación radiación electromagnética con las longitudes de onda 405, 450, 460, 488 y 500 nm, obteniéndose los correspondientes espectros de emisión fluorescente.

Resultados y discusión En la figura 1 se muestra la respuesta fluorescente de la caries dental en solución.

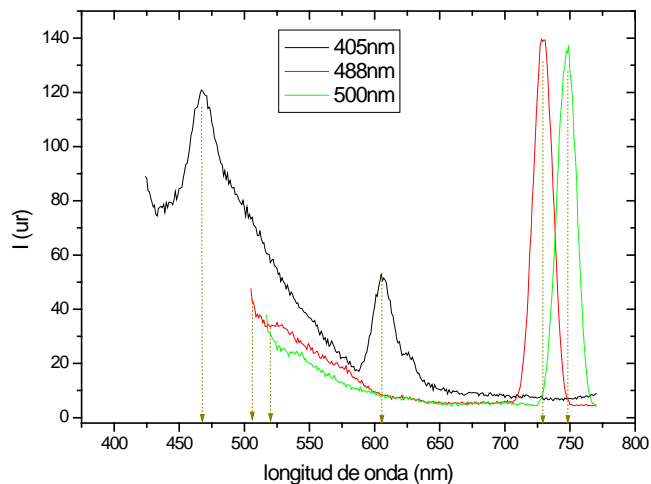


Figura 1. Respuesta fluorescente de la caries dental en disolución.

Se observa en la figura 1, que al excitar la disolución con una longitud de onda de 488 y 500 nm respectivamente se obtienen picos de emisión fluorescente en la región verde y la región infrarroja del espectro, estos últimos con una intensidad considerablemente superior. Mientras que al excitar dicha solución con 405 nm se obtienen máximos alrededor de los 467 y 604 nm. Las unidades utilizadas para describir la intensidad de la radiación emitida son relativas. La emisión fluorescente obtenida es poco intensa, lo que se relaciona con el hecho de que se está analizando una disolución cuyo soluto es la muestra de diente triturado que luego se centrifuga, lo que resulta al final una concentración pequeña de dicho soluto.

La forma de este espectro de emisión es similar a la obtenida en [4]. Teniendo esto en cuenta y los datos conocidos sobre las bandas de excitación y emisión de las porfirinas, se infiere que estas últimas son las causantes de la respuesta fluorescente en la región roja del espectro. Se alcanzan también, como se ven, máximos en la región verde del espectro.

En la figura 2 se muestra la respuesta fluorescente del molar cariado donde se observan manchas rojas de intensidad variable en las zonas del esmalte, que coinciden con la fluorescencia de las lesiones cariosas; estos resultados concuerdan con los espectros que se muestran en la figura 1.

Estas variaciones se hacen aún más evidentes al apreciar la

imagen de la emisión de la placa bacteriana en la figura 3.

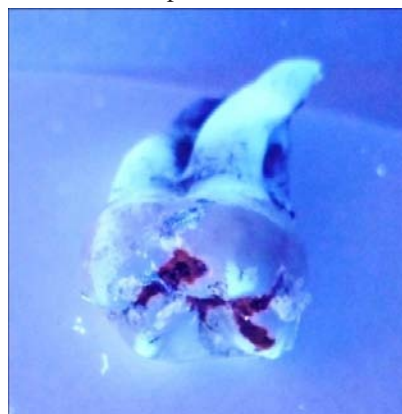


Figura 2. Respuesta fluorescente de un molar cariado.



Figura 3. Respuesta fluorescente de la placa bacteriana.



Figura 4. Respuesta fluorescente del esmalte sano.

En la figura 4, se observa la respuesta fluorescente del esmalte dental sano, no se observa ninguna señal de fluorescencia en la zona roja del espectro, solo una emisión en el verde que cubre todo el tejido. Esta última imagen respalda la afirmación de que las zonas que presentan bacterias cariogénicas (*Streptococcus Mutans*, *Streptococcus Sobrinus*, *Lactobacillus*) son las causantes de la respuesta fluorescente en la región roja del espectro.

La literatura consultada demuestra que la concentración del fluoróforo más relevante está directamente relacionada con la intensidad de la radiación [4, 5]. Las variaciones en la intensidad de la fluorescencia en la región roja que pueden apreciarse en las fotos de las figuras 2, 3 y 4, y las variaciones en la intensidad en los espectros analizados, sugieren que la intensidad de la señal fluorescente emitida, se encuentra en relación directa con la gravedad de la lesión, por estar esta última relacionada con la concentración del agente patógeno. En la caries dental la fluorescencia se identifica con la porfirina producida por la bacteria del tipo *Streptococcus* que juega un papel importante en la formación de la misma. Sin embargo, en principio hay variedad de porfirinas que pueden ser

producidas por diferentes grupos de bacterias.

Pudiera ser de interés poder identificar el tipo de porfirina para cada especie de bacteria que da la emisión roja encontrada. Algunas han sido identificadas, como el *Streptococcus Mutans*, que presenta emisión en 640 nm, pero son varias las especies de bacterias que se encuentran en la cavidad oral como el *Streptococcus Sobrinus*, *Actinomyces Odontologica* y *Actinomyces Naeslundii*, también asociados con caries dental, el *Bacteroides Forsythus* y *Prevotella Intermedia* asociadas con la periodontitis, que como se puede comprender esa identificación requiere esfuerzo adicional futuro.

III. CONCLUSIONES

Se ha mostrado que las lesiones cariosas emiten luz roja bajo la excitación con luz de 405, e infrarroja cercana al excitarlas con 488 y 500 nm. Por otro lado se ve que el esmalte sano no presenta emisión fluorescente en esta región. Esta emisión decrece del verde 510 nm hasta el rojo cuando se excita con luz de 405 nm. La luz roja que se origina desde los fluoróforos es producida por el metabolismo de algunas bacterias intraorales. Su espectro es similar al espectro de las porfirinas, luego es razonable concluir que ese es el fluoróforo relevante. Lo anterior apoya proponer la fluorescencia inducida con LED

azul (405,488 nm) como método futuro para la detección de la presencia de bacterias del tipo *Streptococcus* en la flora bucal y así poder identificar caries incipientes en los servicios estomatológicos de nuestro país.

AGRADECIMIENTOS

Los autores desean agradecer al Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales, IMRE, en especial al Laboratorio LUCES, de la Universidad de La Habana, y al Ministerio de Salud Pública, MINSAP, Servicios de Estomatología, por el apoyo prestado para el desarrollo de las investigaciones presentadas.

-
- [1] S. N. Bhaskar, *Lesiones de los tejidos dentarios duros. Patología Bucal*, 6ta Ed. (Editorial Médica Panamericana, Buenos Aires, 1984). p. 104.
 - [2] E. Rubio, M. Cueto, R. M. Suárez, J. Frieyro, *Bol. Pediatr.* **46**, 23 (2006).
 - [3] F. Coro, *Fisiología celular*, (La Habana, 1996).
 - [4] M. Thoms, en *Lasers in Dentistry XII*, editado por P. Rechmann y D. Fried, *Proceedings of SPIE* **6137** 1, 2006.
 - [5] D. Skoog, F. J. Holler, T. Nieman, *Principios de Análisis Instrumental* (McGraw-Hill, 2004).

IMPLEMENTACIÓN DE UN AMPLIFICADOR LOCK-IN PARA LA MEDICIÓN DE ESPECTROSCOPIA ÓPTICA*

IMPLEMENTATION OF A LOCK IN AMPLIFIER FOR OPTICAL SPECTROSCOPY MEASUREMENTS*

R. HOMS^{a†}, E. PURÓN^{b‡}

a) Departamento de Física, Facultad de Eléctrica, Instituto Superior Politécnico José Antonio Echeverría (CUJAE) rhoms@electronica.cujae.edu.cu[†]

b) Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales, Universidad de La Habana; epuron@imre.oc.uh.cu[‡]

[†] autor para la correspondencia

(Recibido 20/4/2012; Aceptado 18/4/2013)

Se presenta el montaje experimental de una medición de espectroscopia óptica basada en la instrumentación virtual. Se abordan técnicas de procesamiento digital para la implementación de un amplificador lock-in utilizando una tarjeta de adquisición de datos conectada a una computadora personal. La aplicación se desarrolló en C++ sobre la plataforma gráfica de código abierto Qt/Qt. Se realizaron mediciones espectrales de fuentes de luz de referencia para la calibración y validación del sistema.

The experimental set-up of an optical spectroscopy measurement based on virtual instrumentation is presented. A lock-in amplifier has been implemented by applying digital signal processing techniques to a PC-based data acquisition board. The application was developed in C++, on top of open source Qt/Qt graphical framework. The spectral emission of reference light sources were measured in order to calibrate and validate the system.

PACS: Absorption spectroscopy in biophysics, 87.64.K-; Biological systems optical and infrared radiation effects, 87.50.W- , Light-emitting diodes, 85.60.Jb.

I. INTRODUCCIÓN

En el estudio de los materiales y dispositivos opto-electrónicos juega un papel fundamental la caracterización óptica de las estructuras desarrolladas. Entre las técnicas más utilizadas resaltan las mediciones de espectroscopia óptica, las que permiten obtener una amplia información sobre propiedades microscópicas y cristalinas de la muestra, sin necesidad de alterarla mediante procedimientos químicos o mecánicos. El desarrollo actual de la instrumentación para la espectroscopia óptica ha permitido introducir los métodos espectrales en áreas tan diversas como la arqueología, el desarrollo de productos químicos, la industria de pigmentos, la caracterización de dispositivos ópticos, el estudio de microorganismos, la investigación forense, el control médico y farmacéutico, la inspección de alimentos, el análisis de contaminantes, el control de soldaduras y la electrodeposición, por solo citar algunos ejemplos.

El Instituto de Ciencia y Tecnología de los Materiales, IMRE, de la Universidad de La Habana, cuenta con monocromadores soviéticos LOMO adquiridos en los años 80 que conservan el sistema óptico en buen estado, siendo éste el principal componente de un espectrómetro óptico. Las señales de luminiscencia que se miden en la mayoría de los casos son muy débiles y constantes en el tiempo, por ello es necesario

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

desarrollar en la medición métodos de detección sincrónica, los cuales se pueden realizar con un amplificador lock-in (ALI).

II. DESCRIPCIÓN DEL MONTAJE EXPERIMENTAL

El sistema está conformado por: fuente de luz a estudiar, troceador (chopper), monocromador LOMO MDR-4, fotodiodo (S1223), tarjeta de adquisición de datos (NI-USB6008) y PC con el instrumento virtual. En la figura 1 se puede apreciar el diagrama del sistema.

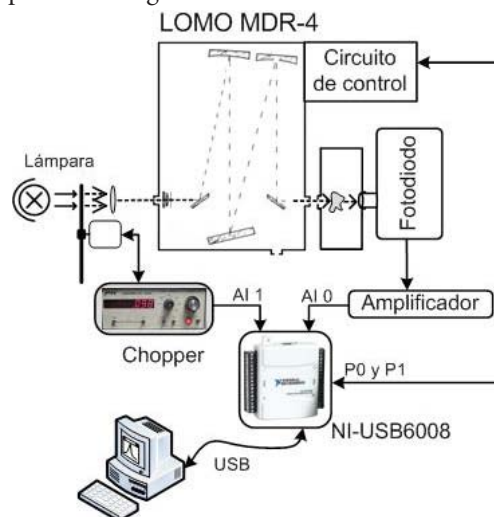


Figura 1. Diagrama del montaje experimental del sistema.

CIRCUITO DEL AMPLIFICADOR DEL FOTODIODO

La señal de salida del foto-diodo es del orden de los nA, siendo necesario realizar un acondicionador de señal para acoplarlo a la tarjeta de adquisición. El fotodiodo tiene dos modos básicos de operación: foto-voltaico (FV) y foto-conductivo (FC), éste último, es recomendado para la instrumentación [5]. El modo FC permite polarizar o no el diodo en inversa, con la polarización se obtiene una mayor sensibilidad, en cambio se introduce una fuente de ruido debido a la alimentación CD. La tensión de salida (V_{OUT}) está dada por:

$$V_{out} = I_s R_f$$

Para una ganancia de $R_f = 30 \text{ M}\Omega$ (2%), una capacitancia intrínseca $C_s = 22 \text{ pF}$ y un factor GPB (Gain Bandwidth Product) igual a 1 MHz, se obtiene una frecuencia de corte $f_{-3dB} \approx 50 \text{ kHz}$. En el sistema de medición, la frecuencia de muestreo utilizada es de 5 kHz limitada por la tarjeta de adquisición, siendo fijado el máximo ancho de banda a 2.5 kHz funcionando además como filtro antialiasing. La frecuencia de corte necesaria es mucho menor f_{-3dB} . Por lo que el filtro se comporta como un filtro de primer orden, definiéndose la frecuencia de corte como [5]:

$$f_c = \frac{1}{2\pi\pi_f C_f}$$

Se escogió una $f_c = 1.3 \text{ KHz}$ por lo que $C_f = 3.9 \text{ pF}$, esta frecuencia garantiza que a 2.5 KHz se tenga una atenuación de 9 dB; el circuito implementado se muestra en la figura 2.

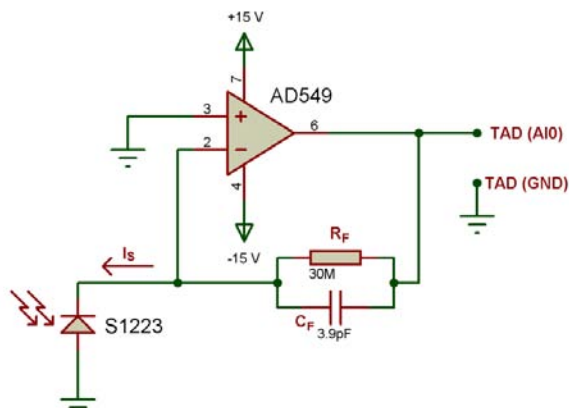


Figura 2. Amplificador de transimpedancia para el fotodiodo.

CIRCUITO DE CONTROL DEL MONOCROMADOR

Se implementó un circuito de control para el monocromador el cual consta de una interfaz con compuertas NOT (LS7404) que actúan como buffers entre la tarjeta de adquisición. Los componentes del circuito, constituyendo un bloque primario de aislamiento y protección.

La parte de control de potencia se realizó con transistores SD339, encargados de conmutar entre corte y saturación y transferir la secuencia necesaria de excitación de las bobinas del motor. A cada transistor se le conectó un diodo en inversa, fundamental para la protección del transistor de la tensión

autoinducida por las bobinas en el cambio de saturación a corte. En la figura 3 se muestra uno de los cuatro canales de potencia.

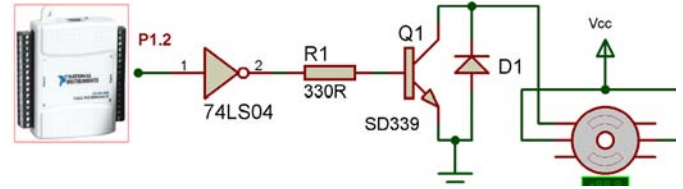


Figura 3. Canal de potencia de las bobinas.

DESCRIPCIÓN DEL SOFTWARE

Como tendencia mundial los grandes centros de investigación migran hacia los sistemas operativos de código abierto. Por ello se escogió como sistema de desarrollo QtCreator 2.0.1 de Nokia basado en las bibliotecas Qt 4.7.0 y el compilador Mingw. La implementación de la GUI (Grafical User Interface) se utilizaron las bibliotecas Qwt-6.0.0-rc5 (Qt Widgets for Technology) las cuales proporcionan un grupo de objetos implementados en Qt 4.7.0 para la instrumentación virtual, entre los que se encuentran gráficos en 2D y 3D, botones e indicadores. La aplicación está corriendo sobre Windows XP. Los drivers de la tarjeta NI-USB6008 sólo soportan Linux RedHat y Suse 11.

El programa se implementó en cuatro módulos fundamentales, figura 4:

- Clases para la atención del monocromador.
- Clase para la implementación del amplificador lock-in.
- Clases para la interfaz usuario.
- Clases de datos.

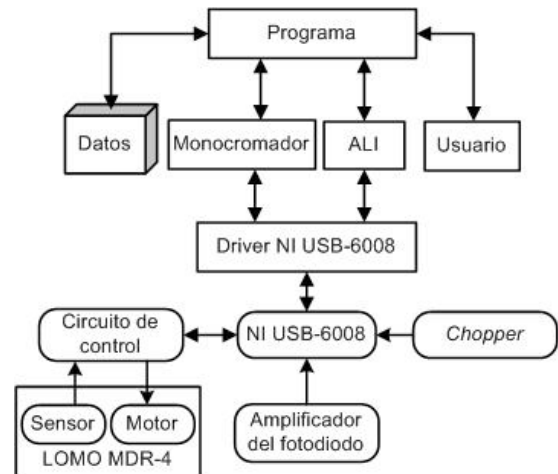


Figura 4. Diagrama en bloque de la aplicación.

PROCESAMIENTO DE LOS DATOS

En el procesamiento de los datos lo primero que se calcula es la frecuencia de modulación, obtenida en un arreglo de muestras de la señal de referencia. Posteriormente se realiza la convolución de los arreglos de muestras de la señal de referencia con la señal de entrada. La convolución de dos señales cuadradas produce una forma de onda triangular.

En los picos positivos las señales se encuentran en fase, sin embargo cuando la amplitud de la convolución es nula ambas señales están desfasadas 90°. Las principales funciones que debe tener la medición sincrónica son la detección de la frecuencia y la diferencia de fase entre las señales, en caso de una errónea detección de los factores anteriores la medición no es válida.

La detección de la diferencia de fase se realiza a partir del cálculo de tres puntos, debido a que la forma de la convolución son dos líneas con pendientes opuestas, se puede interpolar la diferencia de fase existente entre las señales.

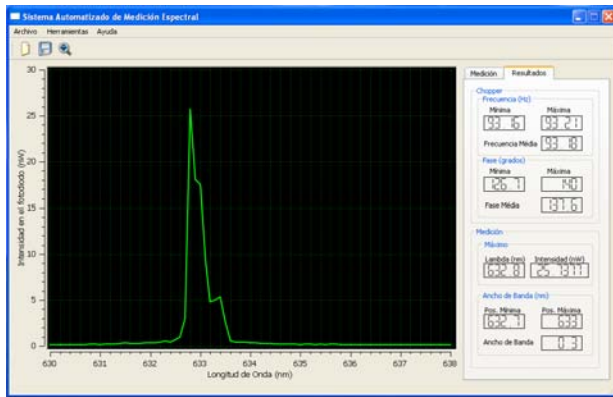


Figura 5. Ventana de usuario del instrumento virtual.

INTERFAZ DE USUARIO

La GUI es amigable, permitiendo una fácil adaptación del usuario con el instrumento virtual, figura 5. Consta de un grupo de controles que le permiten adecuar los parámetros de configuración (intervalo de medición, paso de barrido, tiempo de integración) para cada medición. Incorpora dos herramientas para facilitar la alineación del sistema por el usuario, cuando es modificada la fuente de luz. Los valores medidos son graficados en tiempo real y pueden ser almacenados en un fichero de texto importable por Excel y Origin para su posterior análisis.

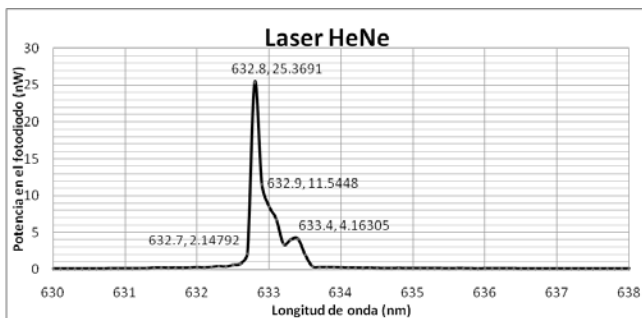


Figura 6. Respuesta espectral del láser de Helio-Neón.

ANÁLISIS Y DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS

Para la calibración del sistema de posicionamiento se utilizaron fuentes patrones con espectros en el intervalo de trabajo. Para ello se utilizó un láser de Helio-Neón (figura 6) y una lámpara de Mercurio (figura 7). De la figura 6 se puede apreciar un pico secundario de menor intensidad, este se produce debido al deterioro del sistema óptico. La amplitud del mismo es cinco veces inferior que la amplitud del máximo principal.

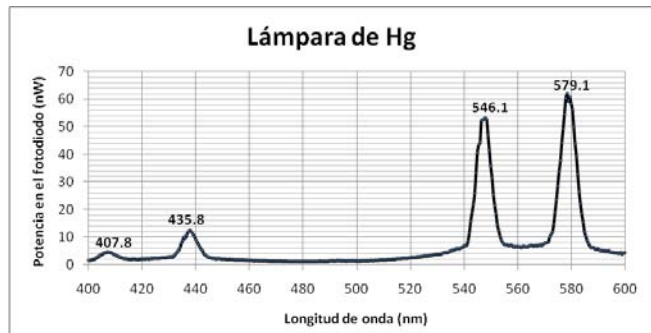


Figura 7. Respuesta espectral de la lámpara de Mercurio.

CONCLUSIONES

La implementación de un amplificador lock-in basado en instrumentación virtual permite la disminución del costo de la medición de espectroscopía óptica. La reproducción del sistema con la reutilización de monocromadores LOMO en experimentos donde no es necesario altos requerimientos instrumental, es posible. La portabilidad del instrumento virtual a plataformas Linux es posible, siendo los driver de la tarjeta NI-USB6008 el que fija la distribución utilizar.

- [1] R. Homs, Implementación de un Sistema de Medición de Espectroscopia Óptica., in Departamento de Automática y Computación. 2011, Instituto Superior Politécnico José Antonio Echeverría: Ciudad de La Habana. p. 80.
- [2] P. A. Temple, Review Science Instrumentation **43**, 7 (1975)
- [3] P. A. Probst and B. Collet, Review Science Instrumentation **56**, 466 (1985).
- [4] P. A. Probst and A. Jaquier, Review Science Instrumentation **65**, 747 (1994).
- [5] Analog Devices, AD549: Ultralow Input Bias Current Operational Amplifier - Datasheet. 2005. p. 12.

DISEÑO Y CONSTRUCCIÓN DE UN DERMATOSCOPIO DIGITAL*

DESIGN AND CONSTRUCTION OF A DIGITAL DERMOSCOPY*

E. ROJAS^{a†}, S. STOLIK^a, J. DE LA ROSA^a, J. ESPINA^a Y M. PÉREZ^b

a) Laboratorio de Láseres, ESIME Zacatenco-Instituto Politécnico Nacional (IPN), Av. IPN S/N, Lindavista, México D.F. 07738, México. piltdown_87@hotmail.com[†]

b) Facultad de Física, Universidad de la Habana, San Lázaro y L. Municipio Plaza de la Revolución, La Habana Cuba 10400.

[†] autor para la correspondencia

(Recibido 25/4/2012; Aceptado 10/4/2013)

En este trabajo se presenta el diseño y construcción de un dermatoscopio digital. El principio de funcionamiento consiste en obtener dos imágenes amplificadas de la lesión pigmentada, una con luz blanca y la segunda con luz en el infrarrojo cercano. Con el software desarrollado, ambas imágenes se superponen con la finalidad de obtener más características que ayuden al médico dermatólogo a diagnosticar el melanoma maligno de manera más confiable y precisa. Se simuló para la geometría utilizada el patrón de irradiación de la superficie y se desarrolló un programa simulador para la irradiancia para cualquier distribución de los diodos emisores de luz.

This paper presents the design and construction of a digital dermoscopy. The operating principle consists on obtaining two magnified images of the pigmented lesion, the first illuminating with a white light source and the second with a near-infrared source. With the developed software, both images are overlap in order to get more features that help the dermatologist to diagnose malignant melanoma with more reliably and accurately. It was simulated for the used geometry the surface pattern of irradiation and it was developed a simulation software for any distribution of light emitting diodes irradiance.

PACS: Light-emitting diodes, 85.60.Jb; Biomedical Instruments, 87.85.Ox; Biomedical Imaging Techniques, 87.85.Pq.

INTRODUCCIÓN

Durante las dos últimas décadas se ha observado un crecimiento en la incidencia del melanoma maligno. El diagnóstico de dichos tumores se realiza mediante la exploración clínica, pero en ocasiones la apariencia clínica de los mismos representa un reto para el médico especialista [1].

La dermatoscopia es una técnica auxiliar diagnóstica, que consiste en la obtención de imágenes en profundidad amplificadas de la piel, que no conlleva penetración corporal para el estudio in vivo de las lesiones pigmentadas melanocíticas y no melanocíticas de la piel [1,2].

La técnica consiste en el uso de un dermatoscopio para la observación de la lesión pigmentada. El dermatoscopio es un instrumento que se compone de una fuente de iluminación y una lente de magnificación que puede ir de los 10x a 400x, generalmente se utilizan lentes de 10x [2].

La técnica de inmersión consiste en un acoplamiento de índices de refracción para disminuir los fenómenos físicos de reflexión y esparcimiento, que son responsables de obtener imágenes de baja resolución espacial y bajo contraste. El índice de refracción del estrato córneo es de 1.55, por ende, cuando se coloca sobre la capa córnea un disco o una superficie de contacto de vidrio

con un índice de refracción muy cercano a 1.55, y se emplea una solución de contacto entre ambas superficies, se logra una disminución de la reflexión de la luz [3,4].

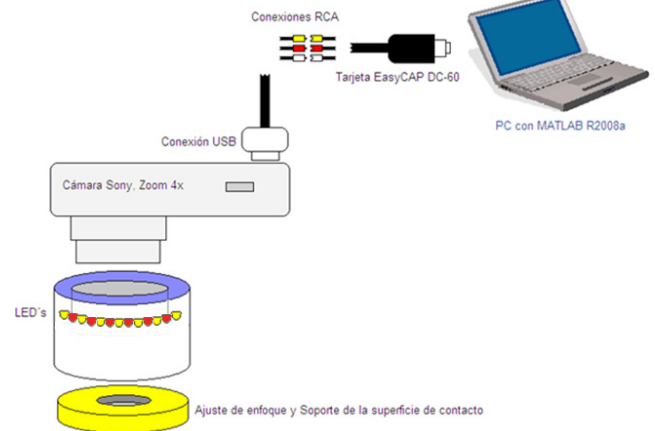


Figura 1. Sistema portátil para la adquisición de imágenes amplificadas de lesiones pigmentadas de la piel.

MATERIALES Y MÉTODOS

El sistema se compone por el dermatoscopio diseñado, el cual se conecta a una cámara digital tipo Sony, la cual se comunica por el puerto USB a la computadora (figura 1). El dermatoscopio se compone de una lente de magnificación de 10x, una fuente de iluminación de luz blanca, una fuente de iluminación en el infrarrojo cercano a 850 nm, que iluminan

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

de manera homogénea la lesión pigmentada y una base para la colocación de la superficie de contacto, para llevar a cabo la técnica de inmersión.

El principio de funcionamiento consiste en obtener dos imágenes amplificadas de la lesión pigmentada, la primera iluminando con una fuente de luz blanca, iluminar con luz blanca permite observar características localizadas dentro de la dermis, la segunda imagen se obtiene iluminando la lesión con una fuente de luz en el infrarrojo cercano, la incidencia de luz a esta longitud de onda permite observar características localizadas dentro del tejido subcutáneo, a mayor profundidad (los LEDs se colocan alternando uno de luz infrarroja con uno de luz blanca, como se observa en la figura 1). Con el software desarrollado, ambas imágenes se superponen con la finalidad de obtener más características que ayuden al médico dermatólogo a diagnosticar el melanoma maligno de manera más confiable y precisa. Y son observadas directamente en la computadora mediante una interfaz desarrollada en Matlab. 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.

Para el diseño de la fuente de iluminación se decidió realizar dos arreglos de 24 diodos emisores de luz (leds), blancos e infrarrojos respectivamente, colocados en un diámetro de 5 cm, separados 15° uno de otro a una altura de 5 cm sobre nuestra área de interés. El área de interés será, tomando como referencia las coordenadas (0,0,0) de un plano (x,y,z), un área igual a πr^2 con $r = 2$ cm sobre el plano (x,y). Se desarrolló experimentalmente un primer arreglo colocando los 24 leds perpendiculares al plano (x,y), y con la ayuda de una mesa x,y, sobre la cual se montó un fototransistor, se midió el patrón de irradiación del arreglo, el cual demostró que en el área de interés la iluminación era muy baja. Para obtener una iluminación homogénea sobre el área de interés, se desarrolló una interfaz en Matlab para la simulación de nuestro arreglo de leds que permitiera variar el ángulo de inclinación de los mismos en dirección al centro del área de interés.

A partir de la medición del patrón angular de emisión de un led (led ideal) (figura 2a), se relacionó la potencia radiante del led con la ecuación del cono, donde el eje 'z' de la figura 2b) corresponde a la potencia radiante del led y el radio del cono depende del ángulo de apertura del led. Asumiendo lo anterior, se aproximó esta medición a una ecuación del tipo

$$x^2 + y^2 - z^2 = 0$$

Una vez obtenida la ecuación que se aproxima a nuestra medición, se procedió a rotar dicho cono con respecto al eje '-y' (figura 2c) simulando la rotación del led a los nuevos ejes coordenados (x',y',z'), y posteriormente trasladándolo a las nuevas coordenadas (h,k,l) con ejes de coordenadas (x'',y'',z'') (figura 2d), para determinar el ángulo óptimo de inclinación con el cual obtendríamos una iluminación uniforme sobre el área de interés.

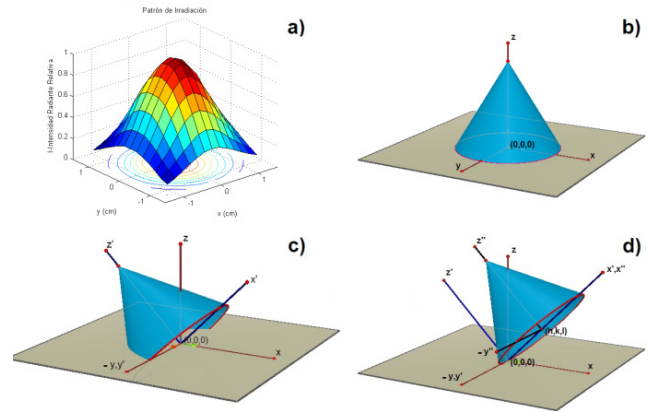


Figura 2. a) Patrón de irradiación de un led, b) cono, c) cono rotado, d) cono rotado y trasladado.

Los parámetros que considera el software son: el número de leds a simular, el ángulo de inclinación de los leds y el radio al cual se quiera simular el arreglo, e internamente ya están definidos la ecuación del cono que describe el patrón de irradiación del led, la altura a la cual están colocados los leds, así como el ángulo de apertura correspondiente al led simulado.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Se obtuvieron las ecuaciones que describen al patrón angular de irradiación del led blanco:

$$f(x,y) = 35.47 - 13.86x - 13.76y^2$$

y del led infrarrojo:

$$f(x,y) = 33.02 + 0.8399x - 0.5753y - 7.255x^2 - 7.337y^2$$

Los resultados obtenidos del simulador para obtener una iluminación homogénea fueron; para el arreglo de leds blancos el mejor resultado se obtenía con una inclinación de los leds de 13°, y para los leds infrarrojos una inclinación de 22°. A partir de estos resultados, en las figuras 3a) y 3b) se muestra el patrón de irradiación obtenido experimentalmente de cada arreglo.

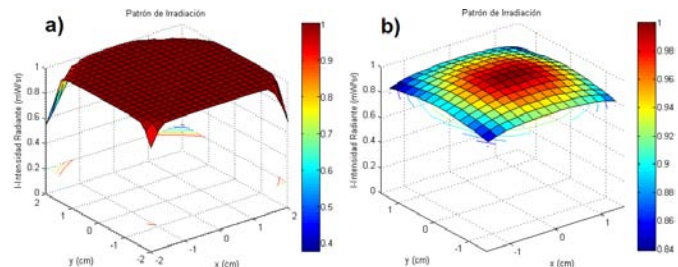


Figura 3. Patrón de irradiación obtenido experimentalmente, a) arreglo de leds blancos, b) arreglo de leds infrarrojos.

CONCLUSIONES

El sistema desarrollado cumple con los requerimientos técnicos de un dermatoscopio para aplicaciones clínicas. Se desarrolló un programa de cómputo para la simulación del patrón de irradiación desarrollado, y se puede aplicar para cualquier distribución de leds para otras aplicaciones. Se

obtuvo una iluminación homogénea para la obtención de imágenes con alto contraste. Se incorporó un arreglo de leds en el infrarrojo cercano para la obtención de un mayor número de características útiles para el diagnóstico. Las imágenes se obtienen directamente en la computadora integrando la información de las imágenes visible e infrarroja.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen al instituto de Ciencia y Tecnología del Distrito Federal (ICyT-DF, PICSA11-41) y al Instituto Politécnico Nacional (Proyecto SIP-20120674). E. Rojas, agradece al CONACYT por la beca otorgada.

-
- [1] R. P. Braun, H. S. Rabinovitz, M. Oliviero, A. W. Kopf y J-H. Saurat, *J. Am. Acad. Dermatol.* **52**, 109 (2005).
 - [2] J. B. Lee, y D. Hirokawa, *Clin. in Dermatol.* **28**, 303 (2010).
 - [3] E. A. Genina, A. N. Bashkatov, y V. V. Tuchin, *Expet. Rev. Med. Dev.* **7**, 825 (2010).
 - [4] A. J. Gewirtzman, J-H. Saurat, y R. P. Braun, *Brit. J. Dermatol.* **149**, 59 (2003).

FOTOLUMINISCENCIA BLANCA EN SILICIO POROSO INFILTRADO CON SEMICONDUCTORES II-VI

WHITE LUMINESCENCE IN POROUS SILICON EMBEDDED WITH II-VI SEMICONDUCTORS

C. DE MELO,^{a†} G. SANTANA,^b J. SANTOYO^c Y O. DE MELO^a

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

b) Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Cd. Universtaria, A.P. 70-360, Coyoacán 04510, México

c) Departamento de Física, Centro de Investigación y Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional, CINVESTAV-IPN, A.P. 14-740, México D.F. 07360, México

[†] autor para la correspondencia.

(Recibido 11/03/2014; Aceptado 12/05/2014)

PACS: Porous materials, 81.05.Rm; II-VI semiconductors, 81.05.Dz; luminescence, 78.47.jd; Transmission electron microscopy (TEM), 68.37.Lp.

El estudio del proceso de llenado del silicio poroso (SP) reviste un particular interés por las potencialidades del mismo para la fabricación de dispositivos luminiscentes [1]. Los dispositivos emisores de luz en todo el visible son tema de investigación actual debido a sus aplicaciones en el campo de los ELBES (Emisores de Luz Blanca de Estado Sólido). Estos dispositivos necesitan de contactos no solo en la superficie externa del SP sino recubriendo todas las paredes internas que rodean los poros, de ahí la importancia del llenado de los mismos.

Nosotros proponemos, en este trabajo, realizar la infiltración de los poros mediante la técnica de crecimiento Vaporización Isotérmica en Espacio Cerrado (VIEC) [2]. Esta técnica ha sido empleada para la obtención de capas delgadas de compuestos semiconductores II-VI (ZnTe, CdTe, CdSe y CdZnTe) y ha demostrado su efectividad en la infiltración del SP y otras estructuras porosas como las membranas de alúmina.

El sistema de crecimiento empleado para la infiltración del SP consta de un bote de grafito que tiene dos compartimentos donde se colocan las fuentes elementales, Zn o Cd y Te separados por un orificio de purga que sirve para la desorción del material en exceso y evita la impurificación de las fuentes. La parte deslizante sirve como soporte para el porta-substrato y a la vez permite la exposición secuencial del mismo a las fuentes elementales a través de un actuador lineal programable (LA12 - PLC LINAK). Los crecimientos fueron realizados a una temperatura de 385 °C y en condiciones de alto vacío (presión de 5×10^{-2} Pa). Previo al crecimiento algunas muestras fueron tratadas químicamente en una solución de H₂O:HF (2:1) por 10 s. Los tiempos de exposición del substrato a las fuentes elementales variaron entre 15 y 60 s, el tiempo de purga fue de 5 s y el número de ciclos varió entre 4 y 15.

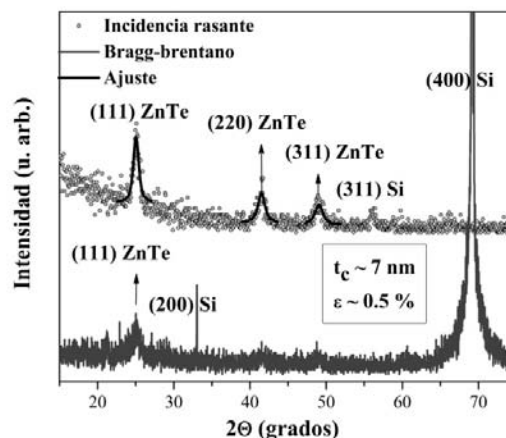


Figura 1: Patrón de R-x realizado a una de las muestras de ZnTe en la configuración de incidencia rasante (puntos grises) y Bragg-Brentano (curva gris). Ajuste realizado a los picos usando la función pseudo-voigt (curva negra).

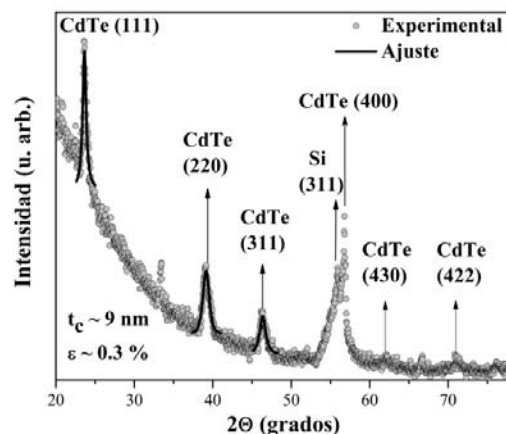


Figura 2: Patrón de R-x realizado a una de las muestras de CdTe en la configuración de incidencia rasante (puntos grises). Ajuste realizado con la función pseudo-voigt a los máximos de difracción (curva negra).

A las muestras se les realizó difracción de rayos x (R-x) en dos configuraciones: incidencia rasante y Bragg – Brentano (Fig. 1), con un difractómetro de polvo Siemens D-500. Los patrones de difracción obtenidos permiten confirmar la formación de CdTe y ZnTe dentro del SP. Se realizó un ajuste con la función pseudo-voigt a los máximos de difracción más intensos que corresponden a los planos cristalinos con índices de Miller (111), (220) y (311).

Para el estudio de la microestructura de las muestras se empleó el método de Langford [3]. A partir de los parámetros obtenidos del ajuste: ancho a la mitad del pico (FWHM), ángulo de Bragg (Θ) y η (peso de la componente lorentziana en el ancho total del pico), se determinó el ancho integral (β) de cada uno de los picos ajustados y las contribuciones lorentzianas (β_L) y gaussianas (β_G) al mismo. Finalmente se determinó el tamaño de dominio coherente (t_c) mediante la ecuación de Scherrer (ecuación 1) y las micro-deformaciones no uniformes mediante la ecuación 2:

$$t_c = \frac{\lambda}{\beta_L \cos(\Theta)} \quad (1)$$

$$\varepsilon = \frac{\beta_G}{4 \tan(\Theta)} \quad (2)$$

donde λ es la longitud de onda correspondiente a la línea K_α del Cu.

En los gráficos de la Fig. 1 y la Fig. 2 aparecen los valores promedios obtenidos para cada muestra.

El tamaño de los granos de ZnTe y CdTe fue determinado de manera directa a través de las imágenes de microscopía electrónica de transmisión (TEM, por sus siglas en inglés) realizadas a las muestras en un microscopio electrónico de alta resolución Jeol, a 200 kV y 110 μ A. En la Fig. 3 se muestran las imágenes tomadas a una de las muestras de ZnTe (a) y de CdTe (b) y se señalan algunos de los granos y su tamaño. Con los valores obtenidos de todas las imágenes se realizó un histograma que muestra la distribución de tamaño de grano en ambos casos (ver Fig. 4).

De las imágenes de TEM obtuvimos un valor promedio de tamaño de grano aproximadamente de 15 nm para el ZnTe y 17 nm para el CdTe y a partir del ajuste de los picos de R-x los valores de tamaño de dominio coherente fueron de 7 nm y 9 nm respectivamente. Estos valores más pequeños se deben a que cualquier defecto en los planos cristalinos dentro de los granos puede provocar que aunque estos sean más grandes los dominios coherentes dentro de los mismos tengan dimensiones menores.

Para la caracterización óptica de las muestras se realizaron mediciones de fotoluminiscencia (PL), utilizando un láser de He–Cd ($\lambda = 325$ nm, potencia de 16 mW). En ambas muestras se aprecia, en la región del borde (no infiltrada), la luminiscencia roja típica del SP (600 nm $< \lambda < 800$ nm) y en

la región del centro (infiltrada con ZnTe o CdTe) aparece una banda ancha en todo el rango visible (400 nm $< \lambda < 700$ nm).

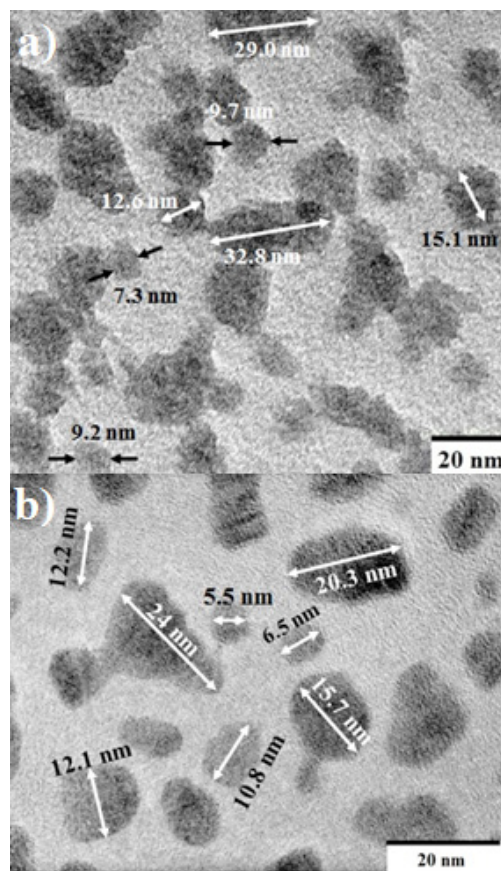


Figura 3: Imagen de microscopía electrónica de transmisión (TEM) realizada a una de las muestras de: ZnTe (a) y CdTe (b).

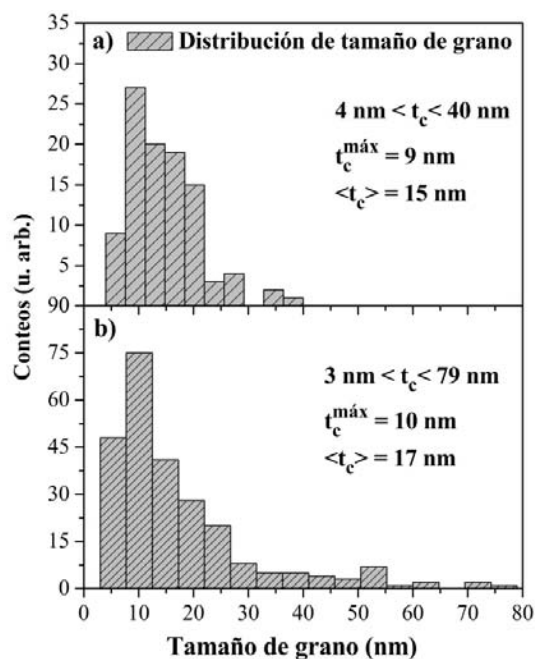


Figura 4: Distribución del tamaño de los granos, obtenida a partir de las imágenes de TEM realizadas a las muestras de: ZnTe (a) y CdTe (b).

Tanto la emisión roja del borde como la emisión blanca del centro se aprecian a simple vista cuando la muestra es iluminada con el láser de He–Cd.

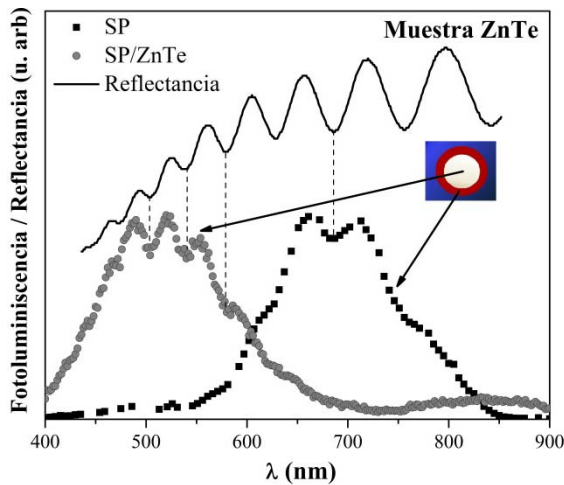


Figura 5: Fotoluminiscencia de una de las muestras de ZnTe en el borde (cuadros negros) y en el centro (círculos grises). La curva negra es el espectro de reflectancia de la muestra.

Ha sido observada luminiscencia blanca en muestras que han sido sometidas a ataques químicos posteriores [4], debido a que disminuye el tamaño de los nanocristales de silicio, lo que produce un corrimiento hacia el azul en la emisión. Sin embargo en la región del borde de la muestra que no fue infiltrada se observa la emisión roja típica de SP, a pesar de que toda la muestra fue sometida al ataque químico.

También ha sido observada emisión en el rango visible en muestras de SiO_2 ricas en carbono [5]. Como el bote del sistema de crecimiento donde se colocan las muestras es de grafito, la presencia de carbono en las mismas pudiera estar justificada. Sin embargo la región del borde (no infiltrada) es la que está en contacto directo con el grafito y muestra la emisión roja típica del SP. Además los mapeos de composición realizados a las muestras [6] no indican la presencia de cantidades apreciables de carbono.

La presencia de ZnO pudiera ser otra de las posibles causas de la emisión en el visible [7]. Sin embargo en los R-x no se observan picos correspondientes al ZnO.

El ZnTe y el CdTe por sí solos no pueden explicar la emisión a energías mayores que 2.26 eV en el caso del ZnTe ni mayores que 1.49 eV en el caso del CdTe. Sin embargo los nanocristales de ZnTe y CdTe que crecen dentro de los poros del SP con dimensiones nanométricas pueden ser los responsables de esta banda ancha en todo el visible ya que el confinamiento cuántico de los pares electrón-hueco resulta en un aumento del gap lo que produce un corrimiento en la emisión a energías mayores, que depende de la dimensión de los nanocristales.

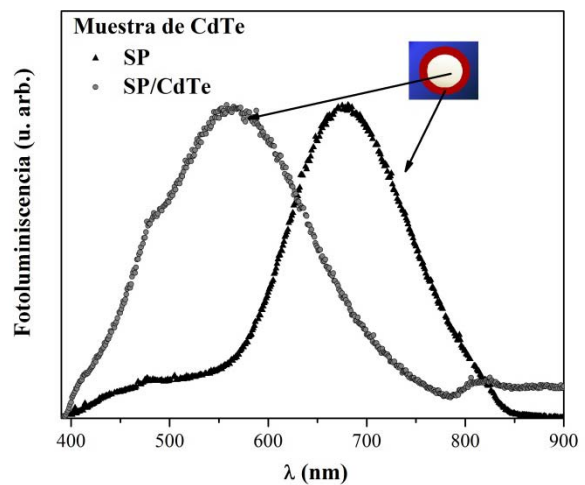


Figura 6: Fotoluminiscencia de una de las muestras de CdTe en el borde (puntos negros) y en el centro (puntos grises).

El confinamiento cuántico de los granos de ZnTe y CdTe parece ser la causa de la intensa luminiscencia observada en estas muestras. Las imágenes de microscopía parecen respaldar esta hipótesis ya que es posible observar granos de dimensiones menores que 10 nm. La gran variedad de tamaño de grano observada en las imágenes de TEM parece ser la causa del ancho de las bandas de emisión.

[1] L. T. Canham, *Appl. Phys. Lett.* **57**, 1046 (1990).
 [2] O. de Melo, E. M. Larramendi, *Rev. Cub. Fis.* **23**, 3 (2006).
 [3] P. Dasgupta, *J. of Crystallography* **35**, 267 (2002).
 [4] O. Bisi, Stefano Ossicini, L. Pavesi, *Surf. Sci. Rep.* **38**, 1 (2000).
 [5] A. V. Vasin, Y. Ishikawa, N. Shibata, J. Salonen, and V. P. Lehto, *Jpn. J. Appl. Phys.* **46**, L465 (2007).
 [6] C. de Melo, S. Larramendi, V. Torres-Costa, J. Santoyo-Salazar, M. Behar, J. Ferraz Dias, O. de Melo. *Micropor. and Mesopor. Mater.* **188**, 93 (2014).
 [7] Y. G. Wang, S. P. Lau, X. H. Zhang, H. W. Lee, S. F. Yu, B. K. Tay, H. H. Hng, *Chem. Phys. Lett.* **375**, 113 (2003).

ADSORPTION OF MOLECULAR HYDROGEN ON NANOSTRUCTURED SURFACES

ADSORCIÓN DE HIDRÓGENO MOLECULAR SOBRE SUPERFICIES NANOESTRUCTURADAS

A. MARTÍNEZ-MESA^{a†} AND G. SEIFERT^{b‡}

a) Facultad de Física, Universidad de La Habana, Cuba. aliezer@sica.uh.cu[†]

b) Institut für Physikalische Chemie, Technische Universität Dresden, Deutschland. gotthard.seifert@chemie.tu-dresden.de[‡]

[†] corresponding author.

(Recibido 15/03/2014; Aceptado 20/05/2014)

PACS: Quantum statistical mechanics of quantum fluids, 67.10.Fj; Hydrogen storage, 88.30.R-; Physisorption, 68.43.-h.

In recent years, many experimental and theoretical investigations have been devoted to understanding the process of light molecule adsorption in nanoporous materials [1-5]. The interest in the evaluation of molecular diffusion rates and storage capacities has been enhanced by several related technological applications like molecular sieving [6,7], reduction of carbon dioxide emissions by vehicles [8], or fuel cells [4]. In spite of being a renewable and environmentally friendly energy source, mobile applications using molecular hydrogen as fuel are presently limited by the lack of efficient lightweight hydrogen storage devices. The most widely accepted strategy to solve this problem is to adsorb hydrogen on solid materials, which requires a detailed knowledge of the fundamentals of adsorption of H₂ molecules. The investigation of the physisorption of light molecules in porous materials is also a topic of current interest from the standpoint of fundamental science. Specifically, many studies have explored the possible manifestation of macroscopic quantum effects, triggered by the confinement imposed on the adsorbates by the host structure. H₂ is the lightest molecule found in nature and it is therefore very appealing as a mean to gain deeper insight into the quantum behaviour of adsorbed molecules.

Contrary to chemisorption, in the process of physisorption the guest molecules interact only weakly with the surface of the host material by means of London dispersion forces. Hence, hydrogen molecules retain their identity upon adsorption. Due to the reversibility and fast kinetics of the physisorption process, it offers a promising alternative for developing novel hydrogen storage technologies for transport applications. The complexity of realistic porous materials, as well as other factors such as the dependence on the pretreatment of the samples, increase the difficulties associated with the interpretation of experimental data. Therefore, the theoretical modelling of the physical adsorption of molecular hydrogen plays an important role in the identification of the microscopic mechanisms governing these phenomena. Quantum effects should be explicitly incorporated in such theoretical models, since deviations from

the predictions based on classical methodologies may become noticeable even at room temperature [9, 10].

Because of the overwhelming effort required to carry out rigorous numerical simulations of the many-body quantum dynamics of adsorbates in the high-density regime, which exceeds the computational resources available nowadays, they remain as a challenging task for both theoretical and computational physics. Compared to the computationally very demanding path-integral calculations, liquid density functional theory in general and the extension to quantum fluids termed as Quantum Liquid Density Functional Theory (QLDFT) [11-13] particularly, constitutes a promising, efficient alternative technique to calculate thermophysical properties of quantum systems in condensed phases.

Concerning the rotational motion of H₂ embedded in nanostructured solids, the molecules are generally expected to behave as free rotors. In fact, the rotational barriers can influence the amount of molecular hydrogen taken in by the substrate only for materials with fairly narrow pores (e.g., rotational hindering can prevent H₂ adsorption [14, 15]). Since intramolecular vibrations can also be regarded as frozen and the electronic ground state of H₂ is characterized by a nearly spherical electron distribution, the thermophysical properties of the adsorbed fluid presented in the remainder of the paper has been computed by treating hydrogen molecules as point particles.

The aim of this work is to attain a deeper understanding of physisorption of molecular hydrogen at surfaces, explicitly accounting for quantum effects triggered by the confinement imposed by the host structure. Owing to the many-body character of the adsorption phenomena, these processes will be described by means of the QLDFT [12] and explicitly accounting for the exchange symmetry of the H₂ molecules [10,13]. The adsorption properties of the target nanostructures (carbon nanotubes (CNT), carbon foams and C₂₈ fullerites) are evaluated in a broad range of thermodynamic

conditions. The influence of both the interaction with the nanoporous environment and the quantum statistics on the adsorption isotherms is investigated. Likewise, we also focus on the microscopic spatial distribution of the adsorbed fluids and its relationship with the structural characteristics of adsorbing media. The evaluation of the thermodynamic properties of the system is carried out in the grand canonical ensemble, at constant volume V , temperature T and chemical potential μ .

Because of the featureless particle modelling of H_2 molecules, all the information about the influence of the molecular size on the adsorption process is masked into the H_2 -surface, $v_{ext}(\vec{r})$, and the H_2 - H_2 , $w(r)$, interaction potentials. The effective Hamiltonian \hat{H}_s governing the dynamics of the Kohn-Sham reference system reads

$$\hat{H}_s = -\frac{\hbar^2}{2M_{H_2}} \nabla^2 + v_{ext}(\vec{r}) + \int w(|\vec{r} - \vec{r}'|) \rho(\vec{r}') d^3\vec{r}' + v_{xc}[\rho], \quad (1)$$

where M_{H_2} and $\rho(\vec{r})$ are, respectively, the mass and the density of hydrogen molecules. The exchange-correlation potential v_{xc} is evaluated, within the Local Density Approximation, from the empirical equation of state of the homogeneous system as described in Ref. [12].

The distribution of H_2 molecules is obtained via a series expansion of the Bose-Einstein distribution function [10] in powers of the scaled and shifted effective Hamiltonian

$$\hat{\rho}_s = \frac{1}{e^{\beta(\hat{H}_s - \mu)} - 1} = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{[-k\beta(\hat{H}_s - \mu)]^m}{m!}, \quad (2)$$

where $\beta = 1/k_B T$ is the inverse temperature. The molecular density $\rho(\vec{r})$ is given by the diagonal elements of the number operator $\hat{\rho}_s$, evaluated using a three-dimensional finite-difference representation of the effective Hamiltonian \hat{H}_s . The grand potential of the interacting system is calculated using a similar procedure [10].

In the present work, a global potential energy surface for the H_2 -surface interaction is built by fitting *ab initio* calculated interaction energies [11] using the pairwise additive functional form

$$v_{ext}(\vec{r}) = \sum_i A e^{-d|\vec{r} - \vec{r}_i|} - \frac{C}{|\vec{r} - \vec{r}_i|^6}. \quad (3)$$

On the other hand, the intermolecular H_2 - H_2 interactions were modelled as Morse functions with parameters $D = 0.291 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, $r_e = 3.511 \text{ \AA}$ and $\alpha = 1.592 \text{ \AA}^{-1}$ [10].

In equation (3), the vectors \vec{r}_i indicate the positions of carbon atoms in the steady carbon structure. Hence, the spatial distribution of the carbon network chiefly influences the hydrogen storage capacity of the adsorbing media via $v_{ext}(\vec{r})$. The host structures to be analyzed in this work are representative of the wide variety of thermodynamically stable carbon allotropes. Carbon nanotubes [16] are paradigmatic examples of nanostructured materials, capable to attract

hydrogen molecules on their inner and outer surfaces. The structure of carbon foams (or honeycomb graphite) [17] is similar to that of the nanotubes, but the walls of their hexagonal pores are made of interconnected graphite-like segments. The geometry of the CNT and of the carbon foams is specified in terms of the so called Hamada indexes (m,n) . On the other hand, C_{28} constitutes one of the smaller fullerenes observed experimentally [18]. Two hypothetical crystalline formations consisting in the arrangement of C_{28} cages in a lattice have been suggested, but only the one known as hyperdiamond will be considered here.

In the calculations, the unit cell was replicated along the three spatial directions until the evaluation of the effective potential was converged. Periodic boundary conditions were imposed to the Hamiltonian \hat{H}_s and the density $\rho(\vec{r})$. The molecular density is computed self-consistently using damped two-point iterations starting from the classical distribution at the specified thermodynamic conditions.

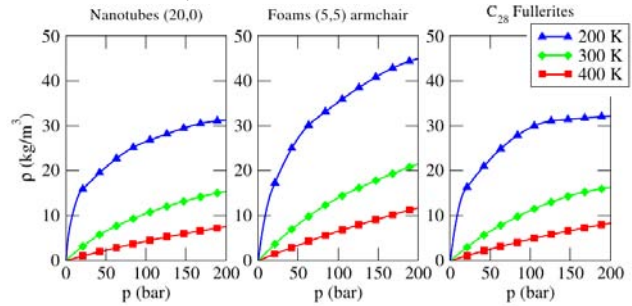


Figure 1: Average density ρ of physisorbed molecular hydrogen inside the interstitial space of selected carbon allotropes, as a function of the pressure of the external gas and at temperatures of 200 K, 300 K and 400 K.

Figure 1 illustrates the behaviour of the adsorption isotherms $\rho(p,T)$ derived within QLDFT. The average concentration of the adsorbed fluid increases as the external gas pressure gets larger, reaching a value of about $30 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ for the selected carbon nanotubes and the fullerites, and $45 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ for the armchair foams, at a temperature of 200 K. A fast deterioration of adsorption capacities with the increase of temperature is also striking. It is worth to notice, that the strength of the H_2 -substrate interaction potential is rather similar for the three structures ($\sim 10 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$). The differences in the hydrogen uptake by CNT and the (5,5) armchair foams is due to the broader spatial extension of the main adsorption sites of the latter. In the case of the C_{28} solid, despite their large attractive area, the adsorption is markedly affected by entropic contributions to the interaction free energy. Indeed, the free energy of a bound H_2 molecule at room temperature is approximately $5 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, whereas this magnitude approaches $8 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ for the other materials addressed here. The deviations in the H_2 -surface binding energy compensates the different accessible volumes for adsorption on the (20,0) nanotubes and the hyperdiamond, yielding nearly identical adsorbed hydrogen densities for both materials.

The most important quantity characterizing the ability of nanostructured surfaces to take up hydrogen is the gravimetric capacity, i.e., the ratio between the weights of adsorbed

molecules and that of the whole system (including the host structure). In figure 2, it can be seen that this quantity closely follows the general trend of the adsorption isotherms presented above. The gravimetric ratio g_w predicted for the (5,5) armchair foams (almost 6%), at a temperature of 200 K and at an external gas pressure of around 200 bar, is among the larger storage capacities found for pure carbonaceous materials. However, it shifts down to 2.5% at room temperature and at moderately large pressures. Nanotubes and fullerenes exhibit gravimetric capacities below 2% at room temperature.

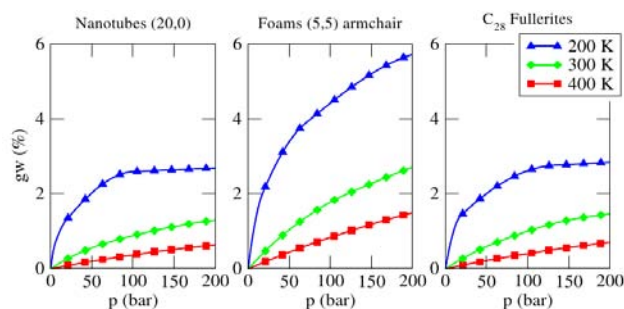


Figure 2: Gravimetric storage capacities g_w of several adsorptive media: carbon nanotubes (left panel), foams (middle panel) and C_{28} fullerenes (right panel). The storage capacity is plotted as a function of the pressure of the external gas and at temperatures of 200 K, 300 K and 400 K.

The microscopic density profiles depicted in figure 3 show the effects of augmenting the average density on the spatial distribution of the adsorbed fluid. These results correspond to the unit cell of a (4,4) armchair carbon foam at a temperature of 200 K. It can be seen, that the molecular density becomes less structured as the average concentration increases. This shows that short-range repulsive forces dominate over the attractive tail of the intermolecular potential, for these thermodynamic conditions. The enhancement of the intensity of the H_2 - H_2 repulsion causes the depletion of the heights of the peaks at the main adsorption sites (close to the corners of the pores) and the subsequent rise of the presence of H_2 molecules at the centre of the cavity.

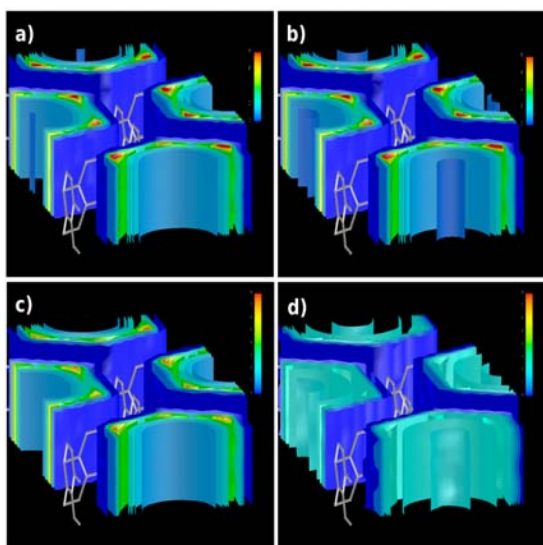


Figure 3: Contour plots of the molecular density inside the unit cell of (4,4) armchair carbon foams, at atmospheric pressure and at a temperature of 200 K. The different panels correspond to progressively larger hydrogen densities: a) $\rho = 0.0625 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, b) $\rho = 0.625 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, c) $\rho = 6.25 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, and d) $\rho = 62.5 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$.

In summary, we have investigated the effect of the structural characteristics of idealized nanoporous environments on the adsorption of molecular hydrogen. The study is carried out within the density functional theory for quantum fluids at finite temperature, which allows to account for the many-body and quantum delocalization effects in a single theoretical framework, thereby enabling rigorous computer simulations of the adsorption isotherms of molecular hydrogen, and the theoretical investigation of several related phenomena in the physisorbed regime, as for example isotope separation via quantum sieving. The geometrical constraints induced by the host surface and by the intermolecular interactions, gives rise to the saturation of adsorption isotherms at large pressures and the flattening of the molecular distribution inside the material pores.

This work was supported by the DFG within the priority program "SPP 1362: Porous Metal-Organic Frameworks".

[1] A. C. Dillon, K. M. Jones, T. A. Bekkedahl, C. H. Kiang, D. S. Bethune and M. J. Heben, *Nature* **386**, 377 (1997)
 [2] W.-Q. Deng, X. Xu, W. A. Goddard, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 166103 (2004)
 [3] J. L. C. Rowsell and O. M. Yaghi, *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 1304 (2006)
 [4] W.-C. Xu, K. Takahashi, Y. Matsuo, Y. Hattori, M. Kumagai, S. Ishiyama, K. Kaneko and S. Iijima, *Int. J. Hydrogen Energy* **32**, 2504 (2007)
 [5] Y. Yürüm, A. Taralp and T. Veziroglu, *Int. J. Hydrogen Energy* **34**, 3784 (2009)
 [6] Q. Wang, S. R. Challa, D. S. Sholl and J. K. Johnson, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 956 (1999)
 [7] X. B. Zhao, S. Villar-Rodil, A. J. Fletcher and K. M. Thomas, *J. Phys. Chem. B* **110**, 9947 (2006)
 [8] L. A. Avalos, V. Bustos, R. Uac, F. Zaera and G. Zgrablich, *J. Phys. Chem. B* **110**, 24964 (2006)
 [9] J. J. M. Beenakker, V. D. Borman and S. Y. Krylov, *Chem. Phys. Lett.* **232**, 379 (1995)
 [10] A. Martínez-Mesa, S. N. Yurchenko, S. Patchkovskii, T. Heine and G. Seifert, *J. Chem. Phys.* **135**, 214701 (2011)
 [11] S. Patchkovskii and T. Heine, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **9**, 2697 (2007)
 [12] S. Patchkovskii and T. Heine, *Phys. Rev. E* **80**, 031603 (2009)
 [13] A. Martínez-Mesa, L. Zhechkov, S. N. Yurchenko, T. Heine, G. Seifert and J. Rubayo-Soneira, *J. Phys. Chem. C* **116**, 19543 (2012)
 [14] T. Lu, E. M. Goldfield and S. K. Gray, *J. Phys. Chem. B* **110**, 1742 (2006)
 [15] G. Garberoglio, M. M. DeKlavon and J. K. Johnson, *J. Phys. Chem. B* **110**, 1733 (2006)
 [16] C. Liu and H. M. Cheng, *J. Phys. D - Applied Physics* **38**, R231 (2005)
 [17] A. Kuc and G. Seifert, *Phys. Rev. B* **74**, 214104 (2006)
 [18] X. Lu and Z. F. Chen, *Chem. Rev.* **105**, 3643 (2005)

OPTICAL MODEL OF THE UNACCOMMODATED HUMAN EYE

MODELO ÓPTICO DEL OJO HUMANO SIN ACOMODACIÓN

C. MUÑOZ-VILLAESCUSA, O. NUÑEZ-CHONGO AND A. J. BATISTA-LEYVA[†]

a) Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC). La Habana 10400, Cuba. abatista@instec.cu[†]
[†] corresponding author.

(Recibido 15/03/2014; Aceptado 20/05/2014)

PACS: Geometrical optics, 42.15.-i; refractive index, 78.20.Ci; eye, 42.66.-p; GRIN devices, 42.79.Ry

Modern techniques for corrective eye surgery require an accurate knowledge of the refractive properties of the eye, personalized for the each patient [1]. With this information the surgeon can, for instance, calculate the shape and extension of the corneal ablations required for attaining the desired correction. Then, if she/he has an adequate model of the eye, the optical power and magnitude of the aberrations of the eye after the surgery can be predicted. To that end, it is necessary firstly to have a biomechanical model that, knowing the size and shape of the ablations, gives the new geometrical parameters of the cornea and, secondly, to introduce these parameters into an optical model that allows following the ray paths all the way from the anterior surface of the cornea to the retina. Although first or third order approximations could be used, exact ray tracing is best. The resulting model could be numerically implemented on a computer, easing the task.

In this contribution we develop an exact ray tracing model for an unaccommodated eye. Through it, accommodation is easily introduced changing the curvature of the surfaces of the crystalline. The final objective is to obtain a computing program that could be used in the ophthalmology services of Cuban hospitals, for a better planning of Refractive Laser Surgery. As far as we know, they currently do not have that possibility.

There are several ways to model the eye. Differences arise from different mathematical representations of the refractive surfaces, the law of dispersion of the media, and the model used for the crystalline. We will model the eye using four refractive surfaces (Fig 1). 1 and 2 represent anterior and posterior corneal surfaces, while 3 and 5 are anterior and posterior crystalline surfaces. Each is described by the equation of an aspherical revolution surface, of the form:

$$x^2 + y^2 + (Q+1)z^2 - 2zR = 0, \quad (1)$$

where Q is the asphericity parameter and R is the radius at the center of the surface. These parameters could be experimentally

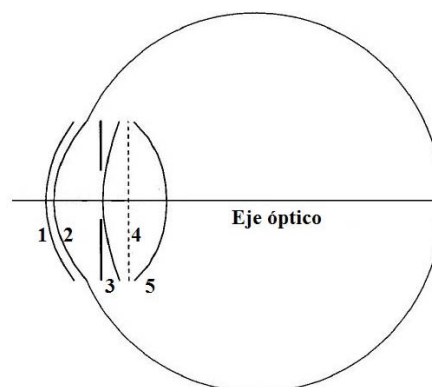


Figure 1: Simplified diagram of the eye. 1 and 2 represent anterior and posterior corneal surfaces respectively, while 3 and 5 are anterior and posterior crystalline surfaces, respectively. Surface 4 represents an auxiliary plane introduced for calculation purposes.

determined by the physician or, in case of a service without such capabilities, can be taken from a database. The values used in this work are given in Table I, and are averages from the best experimental data in literature [2]. Surface 4 is an artificial plane, introduced in order to help in the calculation process.

The algorithm for calculating ray paths is described as:

1. Select the incoming ray and represent it by the equation of a straight line.
2. Intersect this line with the first surface, and obtain the coordinates of the incidence point.
3. Determine the normal to the surface at this point and calculate the trajectory of the refracted ray by the refraction law. Refraction index (after the corresponding surface) and other optical parameters used are listed in Table I.
4. With the equation of the refracted ray, obtain the incident point in the next surface.
5. Repeating this procedure, the position of the ray in the retina or the point of its intersection with the optical axis is obtained.

S	R (mm)	Q	n (0,555 μm)
1	7.77	-0.18	1.376
2	6.40	-0.60	1.336
3	12.40	-0.94	GRIN
5	-8.10	0.96	1.336

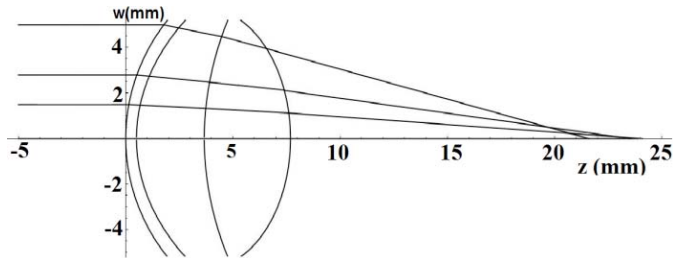


Figure 2: Graphical results of the analytic calculations for four different rays.

An exception is the ray path through crystalline. There is conclusive evidence [3] in favor of a distribution of refraction indices inside the crystalline, indicating that it behaves like a GRIN lens. We choose a parabolic model of GRIN lens [3] frequently used in literature:

$$n(w, z) = n_{0,0} + n_{0,1}z + n_{0,2}z^2 + n_{2,0}w^2. \quad (2)$$

Here n_{ij} are parameters of the model, z is the coordinate along the optical axis and w is perpendicular to it ($w^2 = x^2 + y^2$). This model is the best fit to the experimental data. It is possible to demonstrate that in an axis-symmetric GRIN model, if an incident ray is coplanar with optical axis, it keeps in this plane. n_{ij} has been chosen to provide a refraction index in the experimental range (1.368 – 1.404) [2,3]. Sometimes a simplified model of the crystalline is constructed, assuming an equivalent refraction index around 1.44 [4].

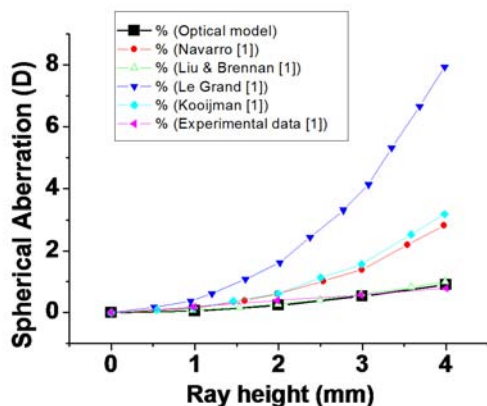


Figure 3: Spherical aberration calculated by our model, compared with other models and experiment.

In most of cases, the shell model [5] is used to calculate ray paths through the crystalline. Here we use Fermat's principle. We did not find any previous report of its use in this task. Minimizing the functional of travel time, the solution of the Euler-Lagrange differential equation gives the trajectory. In this case the equation is highly non-linear, of the form:

$$w''(z) = f_1[w(z), z] \left\{ 1 + [w'(z)]^2 \right\} - f_2[w(z), z] \left\{ w'(z) + [w'(z)]^3 \right\}, \quad (3)$$

where f_1 and f_2 are known functions. This equation was solved numerically, dividing the crystalline in two parts, with different parameters into eq. (2). The surface dividing the two parts is a plane (surface 4 in Figure 1), so it does not have refracting power.

An example of ray paths is shown in figure 2. Spherical aberrations are clearly present.

The maximum of the spherical aberration is calculated as the difference between the optical power for two rays: one very close and parallel to the optical axis, and the other parallel to the first one, but passing by the border of the iris. The results are very close to those in [6], and agree with experiments for rays that are less than 4 mm apart from the optical axis (see Fig. 3).

The model also reproduces well the chromatic aberration at every wavelength. This is calculated assuming normal dispersion for all the components of the eye, with a dependence of refraction index with wavelength equal to that of water, as [2]:

$$n(\lambda) = n(555 \text{ nm}) + 0.0512 - 0.1455 \lambda + 0.0961 \lambda^2 \quad (4)$$

Values of chromatic aberration relative to the wavelength of 555 nm are shown in figure 4. This distribution compares very well with experiments.

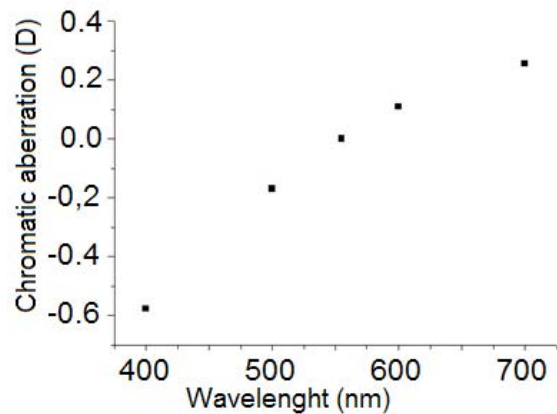


Figure 4: Chromatic aberration calculated by our model.

The model allows to calculate the axial length of the eye. Our result is 23.96 mm, very close to the average value obtained by MRI studies [7].

All in all, the model developed here gives very good results for calculating exact ray paths through the eye, and the optical power (60.32 D) as well as the axial length of the eye. Aberrations are near experimental results.

In the future we expect to develop a different method for the calculation of ray paths through the crystalline, because the one presented here, in spite of its high precision, consumes a lot of computing resources. The present method could then be used as a standard for comparison and evaluation of other models. We also expect to extend the model of crystalline to include accommodation and changes in refraction index with age.

[1] J. Einighammer, T. Oltrup, T. Bende and B. Jean, *J Optom*

2, 70 (2009).

[2] H-L Liou and N. J. Brennan, *Opt. Soc. Am. A* **14**, 1684 (1997).

[3] S. Kasthurirangan, E. L. Markwell, D. A. Atchison and J. M. Pope, *Investigative Ophthalmology & Visual Science* **49**, 2531 (2008).

[4] I. Escudero-Sanz and R. Navarro, *J. Opt. Soc. Am. A* **16**, 1881 (1999).

[5] M. A. Rama, M. V. Pérez, C. Bao, M. T. Flores-Arias and C. Gómez-Reino, *Optics Communications* **249**, 595 (2005).

[6] A. C. Kooijman, *J. Opt. Soc. Am.* **73**, 1544 (1983).

[7] K. D. Singh, N. S. Logan, and B. Gilmartin, *Investigative Ophthalmology & Visual Science* **47**, 2272 (2006).

OBTENCIÓN DE NANOHILOS DE CdS CATALIZADOS POR NANOPARTÍCULAS DE Au

PREPARATION OF CdS NANOWIRES CATALYZED BY Au NANOPARTICLES

P. G. ZAYAS-BAZÁN^{a†}, K. GUTIÉRREZ Z-B^a, G. SANTANA^b, O. VÁZQUEZ^c, J. SANTOYO-SALAZAR^d, G. CONTRERAS-PUENTE^e, J. C. GONZÁLEZ^f, O. DE MELO^a.

a) Facultad de Física, Universidad de La Habana, Colina universitaria, 10400 La Habana, Cuba. patricia@fisica.uh.cu[†]

b) Instituto de Investigación en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Cd. Universitaria, A.P. 70-360, Coyoacán 04510, México D. F.

c) Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, Zapata / G y Mazón, Vedado, La Habana, Cuba. CP 10400.

d) Departamento de Física, Centro de Investigación y Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional, CINVESTAV-IPN, A.P. 14-740, México D.F. 07360, México.

e) Escuela Superior de Física y Matemáticas, Instituto Politécnico Nacional, Unidad Profesional "ALM", México D.F. 07738, México.

f) Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG 30123-970, Brazil.

[†] autor para la correspondencia.

(Recibido 4/2/2014; Aceptado 15/5/2014)

PACS: Nanowires, 62.23.Hj; II-VI semiconductors, 81.05.Dz; Photoluminescence II-VI semiconductors, 78.55.Et.

En los últimos años la obtención de nanoestructuras semiconductoras unidimensionales (1D) ha sido investigada intensamente debido a la gran cantidad de aplicaciones que poseen estas en la optoelectrónica y en las celdas solares de tercera generación. Por otra parte, el CdS es un semiconductor II-VI, tipo-n, típicamente usado como material ventana en celdas solares a capas delgadas [1,2]. Una celda solar basada en nanohilos de CdS como material ventana pudiera elevar grandemente el área superficial del material absorbente (Fig. 1). Además las pérdidas por reflexión y el recorrido de los portadores fotogenerados hacia la juntura pudieran disminuir incrementándose así la eficiencia de la celda.

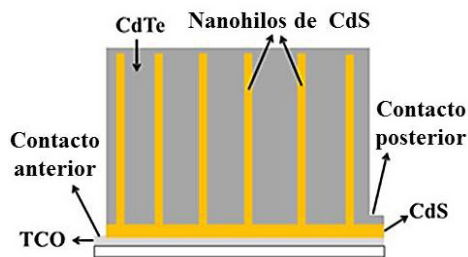


Figura 1: Esquema de una celda solar usando nanohilos de CdS y CdTe como absorbente.

En este trabajo presentamos la preparación, el estudio morfológico y la fotoluminiscencia de nanohilos de CdS utilizando nanopartículas de Au como metal catalizador. Los mecanismos de crecimiento fundamentales que intervienen en la formación de los nanohilos son el vapor-sólido (VS) [3] y el vapor-líquido-sólido (VLS) [4]. En este último mecanismo, se deposita un catalítico metálico sobre la superficie de un sustrato que luego será expuesto a los vapores del material del que se desea fabricar los nanohilos. En nuestro caso se usaron

nanopartículas de Au como catalítico y los sustratos fueron silicio y GaAs. Al calentar el sustrato, se forma una aleación eutéctica entre el catalítico metálico y el material del sustrato. Luego a esta gota líquida llegan los vapores del CdS y cuando esta se sobresatura comienza el crecimiento vertical del nanohilo en la interfaz líquido-sólido.

Para la preparación de los nanohilos de CdS se colocó previamente polvo de CdS en una cápsula de cuarzo. Esta fue a su vez colocada en un bote de grafito que se introdujo en el centro de un reactor de cuarzo. Luego el sistema se calentó hasta 800 °C y se hizo fluir H₂ a presión atmosférica o se realizó un vacío de 10⁻² Pa. En una región del reactor de cuarzo, donde hay menor temperatura, es colocado, en otro bote de grafito, el sustrato que contiene las nanopartículas de oro dispersadas sobre su superficie (véase Fig.2).

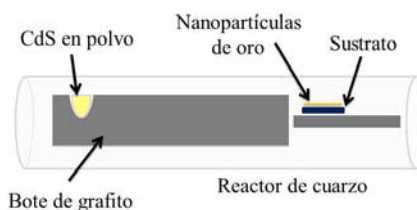


Figura 2: Sistema empleado en el crecimiento de los nanohilos de CdS.

En la Tabla I. se muestran las condiciones experimentales bajo las cuales se obtuvieron cada una de las muestras. Para todas ellas la temperatura en la fuente fue de 800 °C.

Las muestras fueron caracterizadas mediante imágenes de microscopía electrónica de barrido (SEM) y transmisión (TEM). Estas fueron obtenidas por medio de un Microscopio Electrónico de Barrido Hitachi S-530 y uno Jeol de Alta

Definición TEM-JEM-2010, respectiva-mente.

Muestras	Sustrato	Temp. Sustrato (°C)	Ambiente	Tiempo de Exposición
A	Si	568 ± 2	Flujo H ₂	2 horas
B	GaAs	433 ± 5	Flujo H ₂	1 hora
C	ITO/CdS	480 ± 9	Flujo H ₂	15 min
D	GaAs	499 ± 3	Vacío de 2*10 ⁻² Pa	15 min

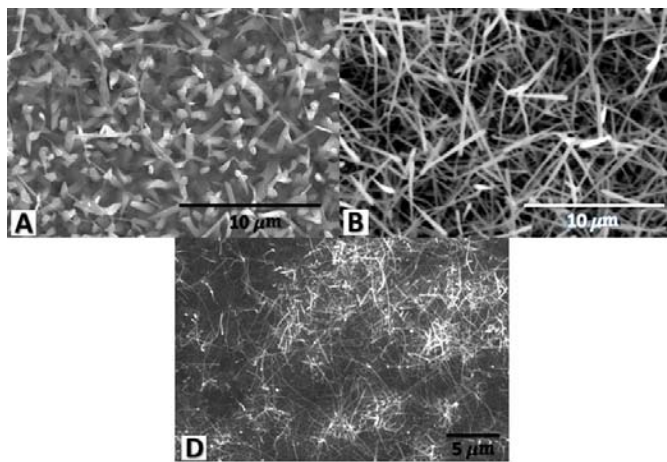


Figura 3: Imágenes de SEM para las muestras A, B y D. Se aprecian diferentes diámetros de los nanohilos en cada muestra.

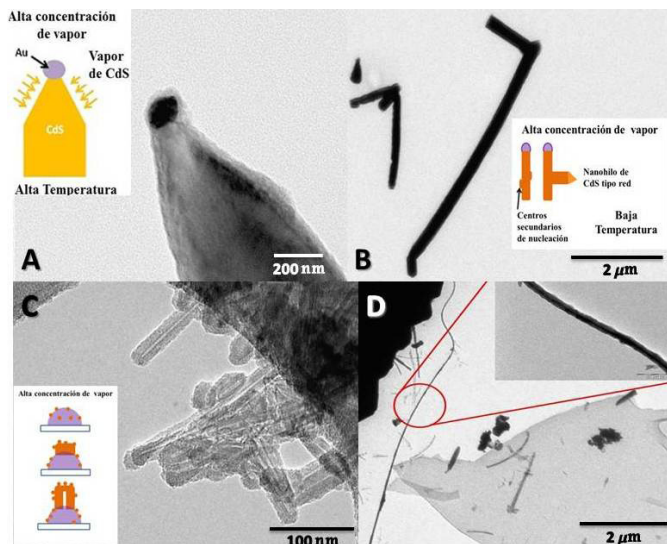


Figura 4: Imágenes de TEM para todas las muestras. Se aprecian diferencias en la morfología en cada caso.

En la Fig. 3 se muestran las imágenes de SEM de las muestras A, B y D. De estas imágenes se puede apreciar como la morfología de los nanohilos es diferente dependiendo de las condiciones de crecimiento en cada caso.

En la Fig. 3A se observa una gran densidad de hilos gruesos con diámetros que pueden llegar hasta los 600 nm. La muestra B reveló un enrejado de hilos mucho más delgados, de alrededor de 150 nm de diámetro (Fig. 3B). En la Fig. 3D se pueden apreciar nanohilos con diámetros parecidos a los de la muestra B pero en una menor densidad, además estos presentan grandes longitudes del orden de las micras.

En la Fig. 4 podemos observar las imágenes de TEM de las muestras crecidas. Con dichas imágenes realizamos un estudio de la morfología de los nanohilos para cada muestra.

En la imagen de la muestra A, (Fig. 4A), se observa un nanohilo grueso con forma de punta. Esta estructura surge ya que en el sistema tenemos una alta concentración de vapor de CdS y alta temperatura. Luego, una vez que se empieza a formar el nanohilo los vapores no sólo se depositan sobre la gota de oro, sino también sobre las paredes de este y por lo tanto el diámetro de los nanohilos aumenta.

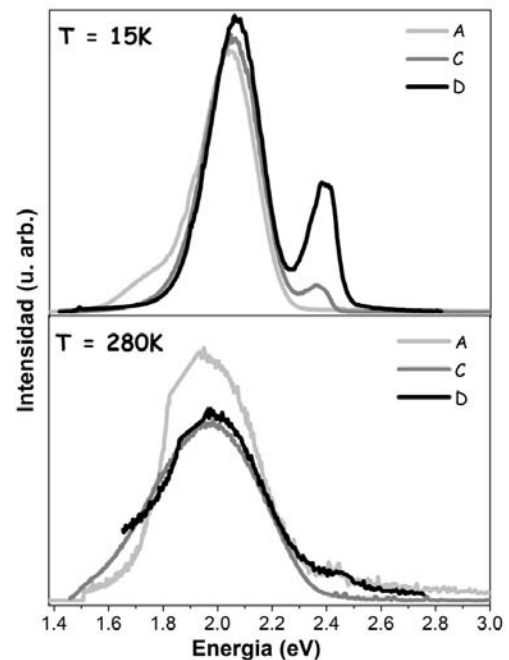


Figura 5: Espectros de fotoluminiscencia de las muestras a 15 K y temperatura ambiente.

Además, en esta imagen se aprecia la nanopartícula de oro en la punta del nanohilo evidenciando que el mecanismo principal de crecimiento es VLS. En la imagen de la muestra B, (Fig. 4B), podemos ver nanohilos en forma de red. Estos surgen debido a que existe una alta concentración de vapor de CdS y las moléculas no sólo se depositan sobre la gota sino también sobre las paredes. Pero debido a que existe baja temperatura en el sistema, estas no se mueven con facilidad creando centros secundarios de nucleación en los cuales comienza el crecimiento de un nuevo nanohilo a partir de este, sin la necesidad de la nanopartícula de Au actuando como catalítico [5,6]. En la muestra C, (Fig. 4C) que fue crecida sobre un sustrato de CdS obtuvimos nanoestructuras con forma de nanotubos. Nosotros suponemos que durante el crecimiento, las moléculas se depositan sobre toda la nanopartícula. De este

modo comienza el crecimiento de la nanoestructura sobre la nanopartícula. Debido a que este crecimiento es rápido, las moléculas de CdS que se depositan sobre las paredes de esta no tienen la suficiente movilidad como para interdifundirse dentro de ella y rellenarla, formándose así el nanotubo. En la muestra D, (Fig. 4D) se obtuvieron nanohilos extra-largos de diámetro constante, que tienen longitudes del orden de 7 micras.

Además, a las muestras A, C y D se le realizaron estudios de fotoluminiscencia a 15 K y temperatura ambiente (TA). Los espectros obtenidos se muestran en la Figura 5. Todas mostraron, incluso a TA, una intensa fotoluminiscencia apreciable a simple vista y con un color amarillo-naranja.

En los espectros se pueden observar dos bandas principalmente: una centrada sobre los 2.0 eV, debida a las vacancias de S^{2-} en la superficie de los nanohilos, y otra sobre los 2.40 eV, asociada a la emisión de la banda cercana al gap [7].

Podemos concluir que fueron obtenidos nanohilos de CdS utilizando el método catalítico como principal mecanismo de crecimiento. Se observó que la temperatura de crecimiento modifica fuertemente la morfología de las nanoestructuras obtenidas. Fueron obtenidos nanohilos con forma de punta en altas temperaturas y a baja temperatura, nanohilos en forma

de red. Cuando el sustrato es una muestra de CdS, se obtienen nanoestructuras con forma de nanotubos. Los espectros de fotoluminiscencia, tanto a baja como a alta temperatura, exhibieron una intensa luminiscencia observable a simple vista. Estos están formados por dos bandas principalmente que se deben tanto a los defectos superficiales de las nanoestructuras como a la emisión de la banda cercana al gap para los nanohilos de CdS.

-
- [1] N. Romeo, A. Bosio, V. Canevari and A. Podestá, *Solar Energy* **77**, 795 (2004).
 - [2] P. G. Zayas-Bazán, G. Contreras-Puente, G. Santana-Rodríguez, E. Hernández, O. Calzadilla, K. Gutiérrez Z-B, J. Sastre-Hernández y O. de Melo, *Rev. Cub. Fis.* **28**, 39 (2011).
 - [3] C. Ye, G. Meng, Y. Wang, Z. Jiang and L. Zhang, *J. Phys. Chem. B* **106**, 10338 (2002).
 - [4] Y. Wang, G. Meng, L. Zhang, C. Liang, J. Zhang, *Chem. Mater.* **14**, 1773 (2002).
 - [5] Y. Xia, P. Yang, Y. Sun, Y. Wu, B. Mayers, B. Gates, Y. Yin, F. Kim and H. Yan, *Advanced Materials* **15**, 353 (2003).
 - [6] S. Kar and S. Chaudhuri, *J. Phys. Chem. B* **110**, 4542 (2006).
 - [7] A. Chandran, S. Samuel M, J. Koshy and K. C. George, *J. Appl. Phys.* **109**, 084314 (2011).

INTRAMOLECULAR VIBRATIONAL ENERGY REDISTRIBUTION IN THE RELAXATION DYNAMICS OF TWO CO ON Cu(110)

REDISTRIBUCIÓN DE ENERGÍA VIBRACIONAL EN LA RELAJACIÓN DE DOS MOLÉCULAS DE CO ADSORBIDAS SOBRE Cu(100)

L. URANGA-PIÑA^{a†} AND J. C. TREMBLAY^b

a) Facultad de Física, Universidad de La Habana, Cuba. llinersy@sica.uh.cu[†]

b) Institute for Chemistry and Biochemistry, Freie Universität Berlin, Takustr. 3, D-14195 Berlin, Germany.

[†] corresponding author.

(Recibido 9/03/2014; Aceptado 20/05/2014)

PACS: Relaxation processes in physical chemistry, 76.60.-k; Ultrafast dynamics, 87.15.ht; Vibrations of adsorbates, 68.43.Pq.

The relaxation of vibrationally excited adsorbates on a metal surface is a very important dynamical process, since it constitutes a key step to understand the microscopic mechanisms underlying more complex phenomena such as the sticking of atoms and molecules on metallic substrates and surface reactions. An important aspect to be addressed in such processes is the role played by the inter-mode couplings, which can be mediated either by an interaction potential between the inter-molecular degrees of freedom or by the weak interaction between the molecules and their environment.

Unravelling the effects of inter-mode coupling on the vibrational relaxation dynamics of molecules in weak dissipative environments is a challenging problem, particularly regarding the solution of the quantum equations of motion. State-of-the-art quantum dynamical methods can not efficiently handle such systems, due to the exponential scaling of the computational cost as the number of degrees of freedom increases. The vibrational relaxation of a molecule in the vicinity of a non-rigid surface is mediated by the excitation of phonons and electron-hole pairs in the solid, the second mechanism being dominant for metallic substrates [1, 2]. Hence, molecules scattering from a surface or sticking on it may be classified as open or dissipative systems, the “bath” being the metal surface. The system-bath separation enables the use of the density matrix formalism for open quantum systems. Therefore, the dynamics of the system is described by the reduced density matrix (RDM), which is obtained by tracing out the “bath” modes.

Although considerable progress has been made in wave packets propagation techniques as applied to multidimensional dynamical problems [3, 4], simulating the time-evolution of the RDM poses much bigger challenges in terms of the associated computational cost, as compared to the numerical

solution of the Schrödinger equation [5, 6]. In this work, we investigate the accuracy of an approximate representation of the vibrational relaxation dynamics, which follows from three central hypotheses: (i) the system-bath coupling is weak and only first-order perturbative rates are relevant, (ii) a contracted grid basis generated via a potential-optimised discrete variable representation (PO-DVR) can capture most of the effects of the intramolecular vibrational energy redistribution (IVR), and (iii) the Lindblad operators representing each dissipative channel can be represented as a tensor product of one-dimensional operators spanning the factorisable space.

These assumptions result in a marked reduction of the grid size and of the scaling of the computational cost with respect to the increase of the dimensionality of the system.

The accuracy of this treatment, as compared to the RDM propagation in the spectral basis, is illustrated for a two-dimensional system of two-coupled Morse oscillators with realistic parameters modelling two interacting CO molecules oriented perpendicular to a Cu(100)-surface. Two-dimensional models historically played a remarkable role in the development of the theory of molecule surface reactions [7, 8] and they can be regarded as a minimal representation of various phenomena such as inelastic scattering of a molecule from a substrate or the adsorption of gas phase atoms at non-rigid surfaces (i. e., the simplest model comprising the essential features of those dynamical processes). Therefore, they appear as a natural starting point to test novel theoretical approaches for which an extension to larger dimensionality problems is envisaged.

The time evolution of the reduced density matrix $\hat{\rho}(t)$ of a Markovian system is governed by the Liouville von Neumann equation

$$\dot{\hat{\rho}} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{H}_s, \hat{\rho}] + \mathcal{L}_D \hat{\rho}, \quad (1)$$

where \hat{H}_s is the system Hamiltonian and \mathcal{L}_D is the Lindbladian superoperator that accounts for dissipation effects. The explicit form of this superoperator is

$$\mathcal{L}_D = \sum_{mn} \frac{1}{2} ([\hat{C}_{mn}, \hat{\rho} \hat{C}_{mn}^\dagger] + [\hat{C}_{mn} \hat{\rho}, \hat{C}_{mn}^\dagger]), \quad (2)$$

where $\hat{C}_{mn}(t)$ are the dissipative operators coupling the system and the bath, in particular representing the ($m \rightarrow n$) dissipative channel. $|m\rangle$ and $|n\rangle$ are eigenstates of the Hamiltonian of the system. In general, the operators \hat{C}_{mn} will describe the “jumps” between eigenstates of \hat{H}_s induced by the interaction with the bath. They depend on the transition rates $\Gamma_{n \rightarrow m}$, which, in the weak-coupling limit, can be evaluated using the Fermi’s golden rule.

For an adsorbate approaching a metallic surface, the mechanism of energy transfer between the vibrational degrees of freedom of the molecule and the electronic degrees of freedom of the surface is mediated by the creation of electron-hole pairs in the metal associated to the transfer of population between two vibrational states of the molecule. In this particular case, the system-bath coupling is the kinetic energy operator of the adsorbate nuclei. The approximate form of the transition rates thus reads

$$\Gamma_{n \rightarrow m} \approx \sum_q \Gamma^{(q)} |\langle n | \nabla_q | m \rangle|^2, \quad (3)$$

where

$$\Gamma^{(q)} \approx \frac{2\pi\hbar^3}{M_q} \sum_{if} \langle i | \nabla_q | f \rangle \delta(E_i - \varepsilon_F) \delta(E_f - \varepsilon_F). \quad (4)$$

$E_i, |i\rangle$ and $E_f, |f\rangle$ are all possible initial and final state energies and wavefunctions of the bath modes, while M_q is the mass corresponding to the motion along the q -th degree of freedom and ε_F denotes the Fermi energy.

It is important to stress that constructing the Lindblad operators in the representation of the system eigenstates demands the knowledge of the multidimensional nuclear wave-functions, $|n\rangle$. In practice, this requirement limits the amount of degrees of freedom that can be treated, especially if a great number of dissipative channels have to be considered. Depending on the number of dissipation channels to be considered, diagonalizing the Hamiltonian may require a tremendous effort from the computational standpoint. This constitutes the main drawback of this particular choice of Lindblad operators when considering multiple channels and several degrees of freedom.

In order to make of numerically converged calculations of larger systems feasible, we propose to express Lindblad operators in a tensor product basis set. Within this approach, the transition rates become decoupled. The advantages of this *ansatz* to tackle the quantum reaction dynamics of multidimensional

systems are striking: the numerical effort associated with the computation of the transition rates scales linearly with the system size. As stated above, this formalism was applied to the study of the vibrations of two CO molecules interacting with each other and approaching a Cu(100) surface. The molecules are assumed to be oriented perpendicularly to the metallic surface, while CO bond length is regarded as fixed (see Fig. 1).

The Hamiltonian of the system is given by

$$\hat{H} = \hat{T}_{q_1} + \hat{T}_{q_2} + \hat{V}_1(q_1) + \hat{V}_2(q_2) + V^{\text{cpl}}(q_1, q_2), \quad (5)$$

where q_i are the separations from each of the CO-centre of masses to the surface, \hat{T}_{q_i} are the one-dimensional kinetic energy operators while \hat{V}_i and V^{cpl} designate, respectively, the potential energy operators corresponding to the motion along the coordinates q_i and the coupling between these two vibrational modes. The parameters of the interaction potentials are chosen to resemble the realistic interactions between the CO molecules and the copper substrate [10].

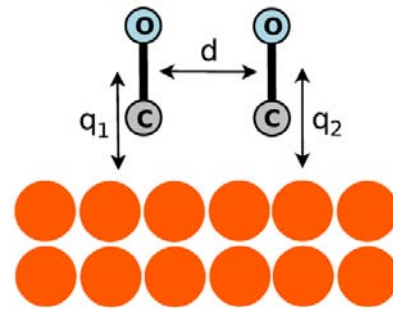


Figure 1: Scheme of the system: two CO molecules approaching a Cu(100) surface. q_1 and q_2 are the distances from each CO centre of mass to the surface, respectively. d corresponds to the distance between the centre of mass of each molecule.

The solution of Eq. (1) requires the specification of an initial state, generally mimicking certain experimental conditions. Here, the initial density matrix corresponds to a pure vibrational state along each degree of freedom, which is denoted as $|2\rangle_{q_1} \otimes |0\rangle_{q_2}$ in product representation, or as $|(n_{q_1}, n_{q_2}) = (2, 0)$ in pseudo-spectral form.

A fourth-order Adams-Moulton predictor-corrector method, initiated by the fourth-order Runge-Kutta integrator, was used to evolve in time the matrix elements of the reduced density matrix according to the dissipative Liouville-von Neumann equation. Convergence tests were carried out for the different parameters influencing the numerical propagation, e.g., the time step and the number of basis functions in the grid representation introduced in the following section, and a step size of 5 a.u. was chosen. The total propagation time was set to 24 ps.

The Hamiltonian (5) can be rewritten as:

$$\hat{H} = (\hat{T}_{q_1} + \hat{V}_{q_1}^{\text{eff}}) + (\hat{T}_{q_2} + \hat{V}_{q_2}^{\text{eff}}) + \Delta\hat{V} \quad (6)$$

The definition of the effective Hamiltonians in (6) is not unique. However, a clever partitioning of the total Hamiltonian may help to shift large parts of the coupling into the operators $\hat{V}_{q_i}^{\text{eff}}$.

Thus, the diffusion term in Eq. (1) gets reduced, ultimately becoming negligible and yielding a purely dissipative dynamics (in the interaction representation). Using a PO-DVR procedure [9], we define the effective contributions so that the coupling $\Delta\hat{V}$ is minimal.

Fig. 2 and Fig. 3 depict the evolution of the wave packets along the q_1 and the q_2 axis, corresponding to distinct coupling strength parameters and to both computational approaches employed in this work, namely, the full spectral representation and the tensor product representation of the Lindblad operators. The representative snapshots were chosen to highlight important changes in the nodal structures along the dissipative reaction path.

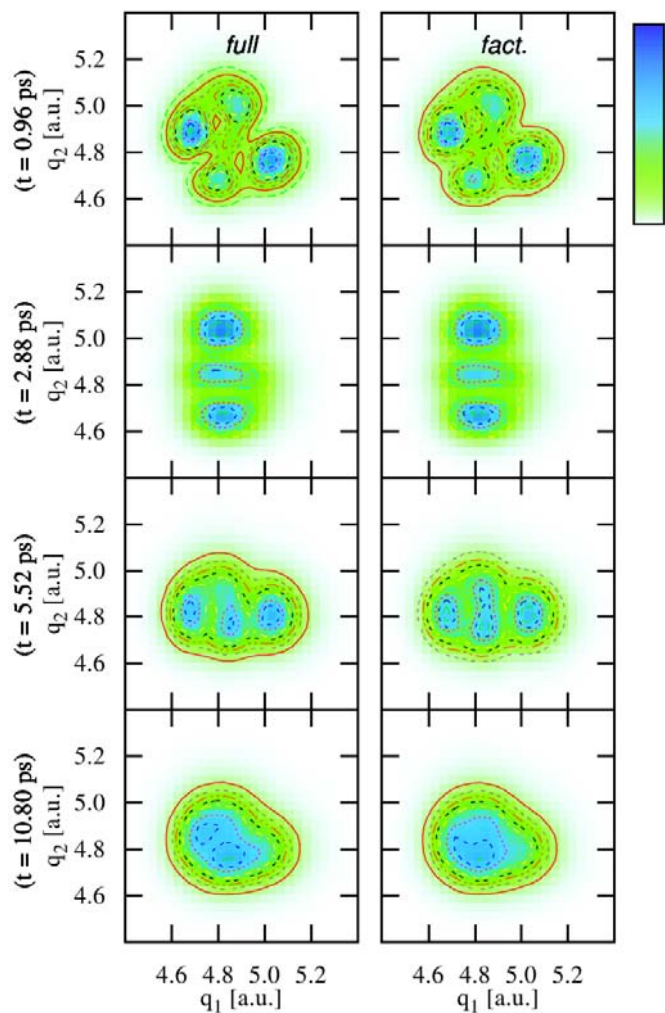


Figure 2: Snapshots of the evolution of the probability distribution for certain points in time, and for weak inter-molecular coupling, ($a = 0.1$) calculated using bi-dimensional Lindblad operators (left panels) and the factorisation *ansatz* (right panels).

The scenario depicted in Fig. 2 corresponds to $a = 0.1$, the small coupling strength (a is the ratio between the well depth of the coupling V^{cp} and that of the potentials \hat{V}_i), in which the two modes are influencing each other and the IVR causes an ultrafast energy flow between them. The energy exchange leads to the inversion of population along each degree of freedom, compared to the initial state, i.e., going from state (2,0) to state (0,2) (see the intermediate panels in Fig. 2). This particular

feature is present at several points in time and it occurs more frequently as the coupling parameter increases. Upon further enlarging the coupling strength, the two-dimensional wave packet can not be described approximately as a Hartree product of single-particle wave-functions corresponding to each dynamical variable. As a consequence, the wave-packet turns out to exhibit the intricate shape observed in Fig. 3. Additionally, it can be confirmed that for intermediate couplings the full-dimensional and the factorization approaches converge approximately to the same values.

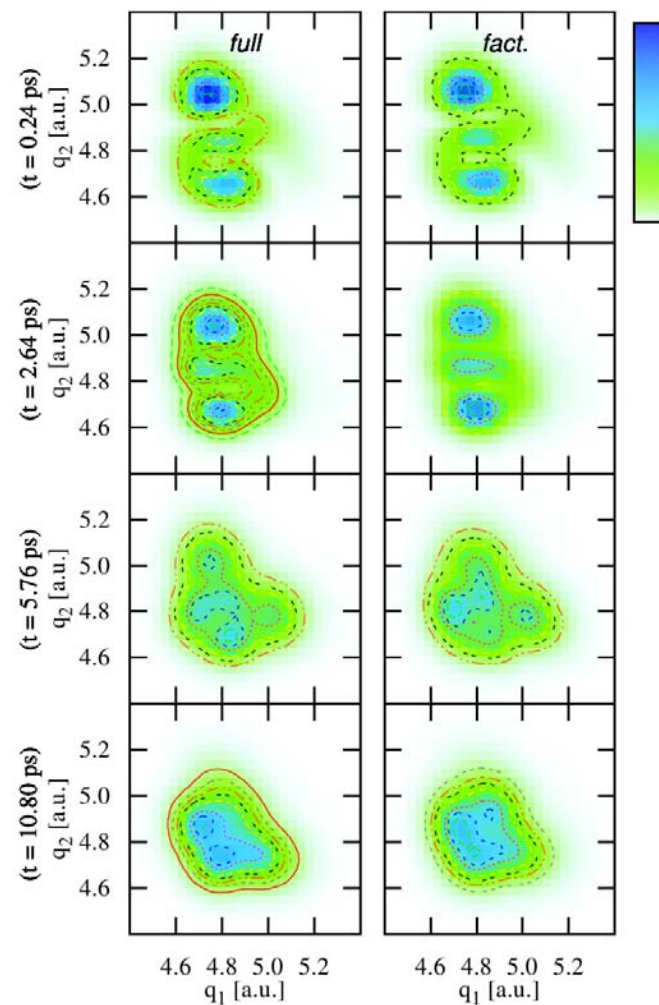


Figure 3: Snapshots of the evolution of the probability distribution for certain points in time, and for strong inter-molecular coupling, ($a = 0.8$) calculated using bi-dimensional Lindblad operators (left panels) and the factorisation *ansatz* (right panels).

In summary, we have analyzed the accuracy of approximating the dissipative operators appearing in the Liouville-von Neumann equation by a tensor product of effective one-dimensional operators. We applied this approach to a system consisting in two CO molecules adsorbed on a Cu(100) surface. The proposed method yields results in close agreement with the propagation scheme based on fully coupled multidimensional Lindblad operators, thereby confirming the validity of the factorisation *ansatz*. The advantage of the form of the dissipative operators presented in this work over the standard spectral approach, lies in the possibility to investigate the

quantum dissipative dynamics in larger systems, that would be otherwise inaccessible.

[1] B. Gergen, H. Nienhaus, W. H. Weinberg and E. W. McFarland, *Science* **294**, 2521 (2001)
[2] N. Shenvi, S. Roy and J. C. Tully, *J. Chem. Phys.* **130**, 174107 (2009)
[3] M. H. Beck, A. Jackle, G. Worth and H. D. Meyer, *Phys. Rep.*

324, 1 (2000)
[4] D. V. Shalashilin and M. S. Child, *J. Chem. Phys.* **115**, 5367 (2001)
[5] H. Guo and R. Chen, *J. Chem. Phys.* **110**, 6626 (1999)
[6] M. Bennant, R. Kosloff and H. Tal-Eze, *Phys. A: Math. Gen.* **25**, 1283 (1992)
[7] P. Saalfrank, G. Boendgen, K. Finger and L. Pesce, *Chem. Phys.* **251**, 51 (2000)
[8] S. Li and H. Guo, *J. Chem. Phys.* **117**, 4499 (2002)
[9] J. Echave and D. C. Clary, *Chem. Phys. Lett.* **190**, 225 (1992)
[10] J. C. Tremblay, G. Füchsel and P. Saalfrank, *Phys. Rev. B* **86**, 045438 (2012)

THE MOST POWERFUL PARTICLES IN THE UNIVERSE: A COSMIC SMASH

LAS PARTÍCULAS MÁS PODEROSAS DEL UNIVERSO: UN REMATE CÓSMICO

WOLFGANG BIETENHOLZ

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

Hemos celebrado recientemente el centenario del descubrimiento de los rayos cósmicos. Aparecen por todas partes en el Universo, y ocurren con energías muy diferentes, incluyendo las partículas más energéticas que existen. Sin embargo, la teoría predice una supresión abrupta (o “corte”) por encima de cierta energía gigantesca. Esto resulta difícil de verificar, las mediciones son controvertidas, pero nos ofrece una oportunidad única de comprobar conceptos establecidos en la Física—como la invarianza de Lorentz— en condiciones extremas. Si las observaciones contradicen a la larga este “corte”, este pudiera implicar la revisión de un pilar fundamental de la Física.

Recently we celebrated the centennial of the discovery of *cosmic rays*. They are whizzing all around the Universe, and they occur at very different energies, including the highest particle energies that exist. However, theory predicts an abrupt suppression (a “cutoff”) above a specific huge energy. This is difficult to verify, the measurements are controversial, but it provides a unique opportunity to probe established concepts of physics—like Lorentz Invariance— under extreme conditions. If the observations will ultimately *contradict* this “cutoff”, this could require a fundamental pillar of physics to be revised.

PACS: History of science, 01.65.+g; Cosmic rays, 96.50.S-; Lorentz Invariance, 11.30.Cp

I. DISCOVERY OF COSMIC RAYS AND AIR SHOWERS

Throughout our lives we are surrounded—and penetrated—by various types of radiation. Mankind was already aware of that in the beginning of the 20th century, when instruments (like the electroscope) were developed to detect ionizing radiation, and sources inside the Earth (like the alkaline metal radium) were identified. But does all the radiation around us originate from the Earth?

If this was the case, the radiation intensity should decrease rapidly with the height above ground. In 1910 the German Jesuit Theodor Wulf performed tests on top of the Eiffel tower, but they did *not* confirm the expected decrease. People criticized, however, that the presence of tons of metal might have affected his results. More stringent experiments were done on balloons; in particular in 1912 the Austrian scientist Viktor Hess observed in seven balloon journeys that the ionizing radiation decreases only mildly up to a height of about 2000 m above ground, but as he rose even higher (up to 5350 m) it gradually *increased* again. He interpreted this observation correctly: significant radiation must come from outside the Earth. Comparing data taken at day and night, and during an eclipse, he also concluded that the sun cannot be a relevant source of these *cosmic rays*.

As a further milestone, in 1938 the French physicist Pierre Auger noticed that Geiger counters which were well separated (by tens or hundreds of meters) often detected radiation



Figure 1: Viktor Hess (on the left) and Pierre Auger (on the right), the men who discovered the cosmic rays and the air showers, respectively.

practically at the same time. He explained this effect as follows: a powerful cosmic ray particle (a “primary particle”) arrives from outer space and hits the terrestrial atmosphere. Its violent collision with molecules of the air triggers a cascade of “secondary particles”, which we call an *air shower*. Auger noticed that he had detected secondary particles belonging to the same air shower, which arrive on ground almost simultaneously. The formation of an air shower is illustrated in Figure 2.

It can be compared to a white “primary” billiard ball, which hits (in the beginning of a game) a number of colored balls, so its momentum is transferred and distributed over numerous “secondary” balls. However, in an air shower new “balls” are

created in the collision, and in the subsequent evolution; the more powerful the primary particle, the more secondary particles emerge.

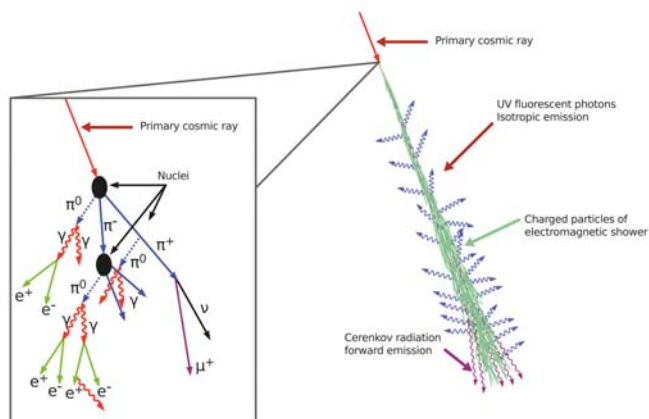


Figure 2: Illustration of an air shower. We recognize the so-called fluorescence light (UV or bluish), and the generation of light particles named pions (π), which rapidly decay into even lighter leptons (e , μ , ν) and photons (γ).

By analyzing his data taken at sea level and in the Swiss alps, Auger conjectured that some primary particle energies should be at least of the order of 10^{15} eV.¹

The kinetic energy is a measure for how much work is needed to accelerate an object from rest to a given speed. For comparison, a table tennis ball with a speed of 34 cm/s has the same kinetic energy, 10^{15} eV, but a $5.4 \cdot 10^{23}$ times larger mass, if we assume the primary cosmic ray particle to be a proton (we recall that the tiny nucleus of a hydrogen atom consists of a proton).

II. THE PROFILE OF THE COSMIC FLUX

Today we know about cosmic rays in the energy range of $E \approx 10^9 \dots 10^{20}$ eV. Up to now we only know of their existence, but very little about their origin.² The top energy, about 10^{20} eV, is 100 000 times larger than Auger's estimate. This corresponds to the kinetic energy of a tennis ball with 85 km/h, a table tennis ball with 392 km/h (for comparison, the hardest smashes in professional table tennis games attain about 100 km/h).

One assumes the high energy cosmic rays to consist to about 90 % of protons, and to 9 % of helium nuclei. They are whizzing all around the Universe, in all directions, at any time. We may wonder how many there are, *i.e.* how many cosmic ray particles cross a given area per time. This is what we denote as the cosmic *flux*. Over the entire energy range, this flux follows closely a curve proportional to $1/E^3$, see Figure 3. So if we double the energy at which we measure the flux, it will decrease by a factor of 8. The validity of such a simple rule over such a

1 An electron volt (eV) is the energy that it takes to displace an object with the electric charge of an electron against the voltage of 1 V. It is a very small unit of energy, which is commonly used in quantum physics. We can convert it to macroscopic units as follows: $6.2 \cdot 10^{18}$ eV = 1 J = 1 kg m²/s², and 10^{18} means 1 000 000 000 000 000 000 (18 zeros).

2 Radiation at lower energy is also present, and here the sun does contribute significantly, but we do not denote that as "cosmic rays".

huge range is very remarkable; the ratio between its lowest and highest energies corresponds to the ratio between the size of a human body and our distance from the sun. This is impressive, but the reason for this rule is not understood.

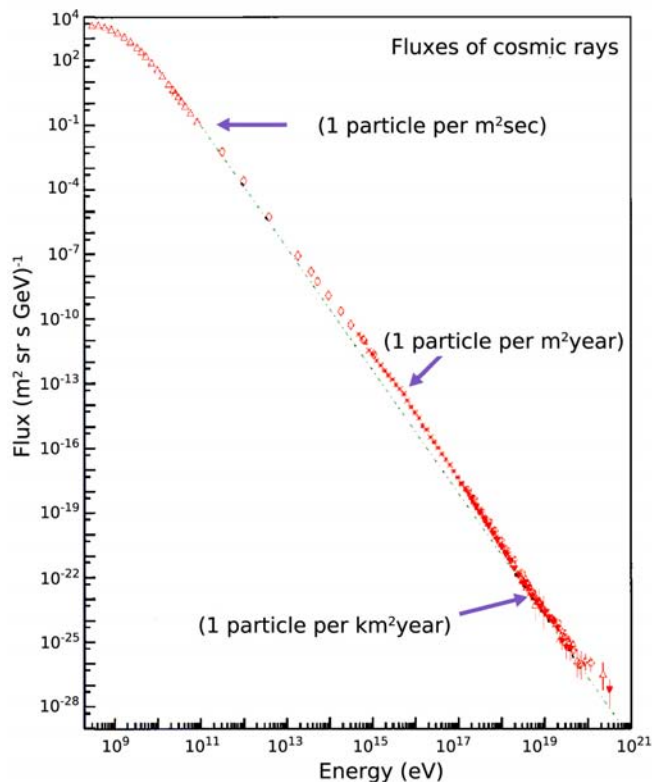


Figure 3: The flux of cosmic rays as a function of the energy. Over a very broad energy interval it falls off approximately proportional to $1/E^3$ (dashed line). Around $E = 6 \cdot 10^{19}$ eV an abrupt flux reduction is predicted; this is the GZK cutoff.

Around 10^{12} eV the flux is 10 primary particle per minute and m² (convenient for measurements), but as we approach the upper end of the known spectrum, say between 10^{18} and 10^{19} eV, we are left with only 1 primary particle per year and km²; here the detection takes a large area, and a lot of patience. But what happens at *even higher energy*, does the flux continue with the same $1/E^3$ power law and we just haven't measured it well so far?

III. FROM THE COSMIC MICROWAVE BACKGROUND TO THE PREDICTION OF THE "GZK CUTOFF"

In 1965 Arnold Penzias and Robert Wilson discovered (accidentally) the Cosmic Microwave Background (CMB), which is a relic of the Early Universe: its photons (the quanta of electromagnetic radiation) decoupled some 380 000 years after the Big Bang, when the Universe only had 0.0028% of its age today. This photon radiation cooled down ever since, so at present the CMB—and therefore the Universe—has a temperature of 2.73 K.³ This means that one cm³ contains in average 411 CMB photons, with a mean wave length of 1.9 mm, which corresponds to a tiny energy of 0.0006 eV.

3 The absolute temperature minimum is 0 K = -273.15 °C, hence the CMB temperature corresponds to -270.42 °C.



Figure 4: From left to right: Kenneth Greisen (1918 – 2007), Georgiy Zatsepin (1917 – 2010) and Vadim Kuz'min (born in 1937), the theoretical physicists who predicted in 1966 the “GZK cutoff” for the cosmic ray spectrum.

One year later, this discovery led to an epoch-making theoretical work, independently by Kenneth Greisen at Cornell University (state of New York), and by Georgiy Zatsepin and Vadim Kuz'min at the Lebedev Institute in Moscow [1]: they (we denote them as GZK) predicted the cosmic ray spectrum to have a “cutoff” around $E_{GZK} = 6 \cdot 10^{19}$ eV, *i.e.* they predicted that the flux above E_{GZK} should nearly vanish. These two papers have a renowned status, although they were both short, with hardly any formulae, but with a groundbreaking idea.

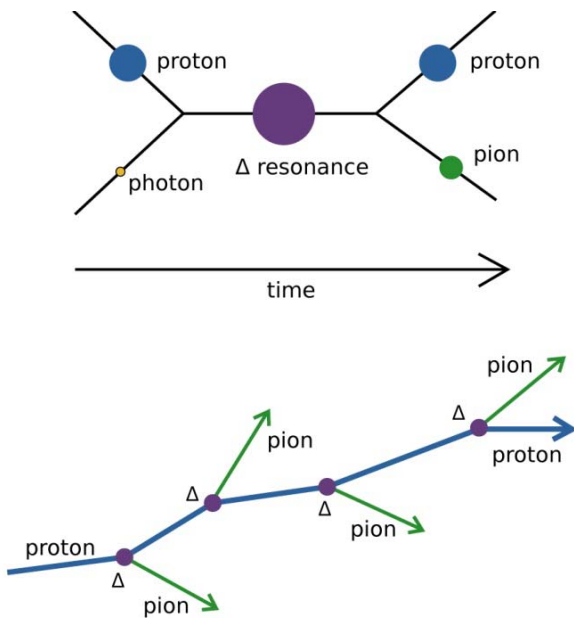


Figure 5: Above: The scheme of photopion production due to the collision of an ultra high energy proton with a CMB photon. Below: Trajectory of a super-GZK proton (a proton with energy above E_{GZK}) through the CMB, suffering energy attenuation due to repetitive photopion production.

Their point was that the scattering of protons with photons can generate a heavier particle, which we now denote as a “ Δ resonance” (similar to a violin string vibrating above its fundamental frequency). It is short-lived, and its decay reproduces the proton, along with an (aforementioned) lighter particle called pion (“photopion production”), as illustrated in Figure 5 above.⁴ The pion carries away part of the energy,

4 Photopion production can also occur in a less direct way, where Δ first decays into a pion and a neutron, and the latter is converted subsequently into a proton through β -decay. These two channels together cover 99.4 % of the Δ decays.

typically about 20 %.⁵ E_{GZK} is just the threshold energy for a cosmic proton to create such a Δ resonance when hitting head-on a (relatively energetic) CMB photon. So if a proton with an even higher energy travels through the Universe, it will undergo this process again and again, and lose energy each time, until it drops below E_{GZK} . This step-wise attenuation is sketched in Figure 5 below.

As a rough picture, we could imagine a car driving very fast, above the speed limit. As a consequence it touches obstacles here and there, say without a bad accident, but losing speed each time. This is repeated until the car has slowed down below the speed limit, then it does not suffer from further collisions anymore. So at the end of a long road, all cars will necessarily arrive with an allowed speed.

Considering the photon density that we mentioned above, and the target area (“cross section”) for a proton-photon collision leading to a Δ resonance (around 10^{-28} cm²), the mean free path length—between two such collisions—for a proton just above E_{GZK} is around 15 Mpc.⁶ If the initial proton energy is much higher, the energy attenuation is much more rapid, since photopion production is more frequent, and the proton loses more energy each time. In that case also the emission of several pions is possible (cf. footnote 5).

One concludes that protons can travel maximally about $L_{max} = 100$ Mpc with super-GZK energy, $E > E_{GZK}$. If the primary ray consists of heavier nuclei, this maximal distance is shorter, because such a nucleus tends to break apart under scattering, such that its fragments lose even more energy.⁷

L_{max} is a long distance compared to the radius of our galactic plane of about 0.015 Mpc, but it is short compared to the radius of the visible Universe, which is around 14000 Mpc. So if sources of ultra high energy cosmic rays are spread homogeneously in the Universe, the flux that we observe on Earth should have a strong extra suppression as the energy exceeds E_{GZK} , pushing its intensity well below the extrapolated $1/E^3$ rule. This is not a strict cutoff—although it is referred to as the “GZK-cutoff”—but it is an interesting and explicit prediction. Its verification, however, is a tough challenge for our best observatories, due to the tiny flux at $E > E_{GZK}$ (cf. Section 2).

IV. OBSERVATIONS OF ULTRA HIGH ENERGY COSMIC RAYS IN THE 20TH CENTURY

In 1963, already before this prediction was put forward, one super-GZK event with an estimated energy of 10^{20} eV was reported by John Linsley, based on an air shower detected in

5 For proton energies well above E_{GZK} also higher resonances are possible, where the decay may yield several pions, so that the proton loses even more energy.

6 One parsec (pc) is a standard length unit in astronomy, which corresponds to $3.1 \cdot 10^{16}$ m, or 3.3 light-years. 1 Mpc = 10^6 pc means one million of parsecs.

7 Nevertheless the recent literature also considers iron nuclei (Fe) as possible primary particles of ultra high energy cosmic rays.

the desert of New Mexico (USA). This issue attracted interest world-wide. Greisen expressed his surprise about that, and added that he did not expect any events at even higher energy.

Nevertheless, in 1971 another super-GZK event was observed in Tokyo, this time with even higher energy. This inspired the construction of a large observatory near the Japanese town Akeno, which is called AGASA (Akeno Giant Air Shower Array). Until the end of the last century AGASA dominated the world data about ultra high energy cosmic rays. It recorded about two dozens of new super-GZK events, and compatibility with the $1/E^3$ rule also beyond GZK, *in contrast to the prediction* [2]. This picture was essentially supported by somewhat smaller installations in Yakutsk (Russia) and Haverah Park (England). The world record is generally considered a primary particle with $3 \cdot 10^{20}$ eV, reported in 1991 by the Fly's Eye detector in Utah (USA), which was designed like the compound eye of an insect.

We are lucky that such ultra high energy rays form air shower about 15 km above ground, so that their energy is dispersed over many secondary particles, rather than hitting us directly. In macroscopic terms, this energy world record corresponds to 48 J, and to the kinetic energy of a tennis ball with a considerable speed of 147 km/h. If the ball drops in vacuum from a tower of 85 m height, it will hit the ground with this speed (with air resistance it never gets that fast). This is still not the maximal speed in a professional tennis game; the second service of Novak Djokovic —currently the tennis star number one— is around 160 km/h, and his first service sometimes exceeds 200 km/h. According to AGASA even that energy should be reached by single cosmic protons.

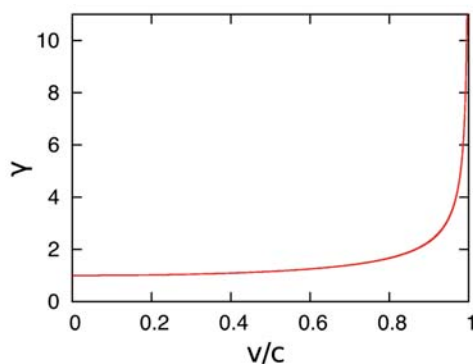


Figure 6: The boost factor γ as a function of the relative speed v in a Lorentz transformation. This speed is displayed in units of c , the speed of light. $\gamma = 1/\sqrt{1-v^2/c^2}$ is close to 1 if $v \ll c$, but it diverges as v approaches c .

V. DOUBTS ABOUT A FUNDAMENTAL LAW OF PHYSICS?

Is this true, despite the stringent theoretical argument by Greisen, Zatsepin and Kuz'min? This scenario fascinates physicists, since it would be a clear indication of a phenomenon at tremendous energy, which is incompatible with our established theories, so its explanation would require *new physics*. Several ideas were elaborated to explain the possible failure of this prediction. The most prominent approach is a

violation of Lorentz Invariance, see e.g. Ref. [3], and Ref. [4] for a recent review.

Lorentz Invariance means that observers moving with constant speed relative to each other —for instance living on different space stations— perceive the same laws of physics, hence there is no “preferred” reference frame. This is one of the most fundamental pillars of our physical concepts. The observed quantities are transformed according to simple formulae of Einstein's Theory of Relativity (“Lorentz transformation”). In particular the speed of light, $c \approx 3 \cdot 10^8$ m/s, must be invariant.⁸ A Lorentz transformation is characterized by a boost factor called γ , which translates for instance a length, a time period or an energy as it is perceived by the two observers. γ grows monotonously with the relative speed between the observers, *i.e.* a faster speed implies a larger γ . It goes towards infinity when this relative velocity approaches the speed of light, see Figure 6. So in this case the perceptions of the two observers —e.g. of the length of a given object— are drastically different.

The validity of Lorentz Invariance is very well tested and confirmed with our most powerful particle accelerators up to γ -factors around 10^5 , in particular due to the Large Electron-Positron Collider (LEP), which was operating at CERN in Geneva from 1989 to 2000.⁹ This excludes “preferred reference frames” at that level. Here the observers move relative to each other with 99.99999995 % of the speed of light. (No massive object can ever attain exactly the speed of light —that would require an infinite amount of energy.)

What does this imply for ultra high energy cosmic rays? So far we have tacitly assumed Lorentz Invariance to hold. For example, the mean free path length of a cosmic super-GZK proton —before performing the next photopion production— that we mentioned in Section 3 (some 15 Mpc) is based on measurements of the proton-photon cross section in laboratories. Actually our accelerators cannot provide such tremendous proton energies. Even the most powerful accelerator in history, the LHC (referred to in footnote 9) stays far below that. One may use, however, protons at rest and expose them to a photon beam of about $200 \text{ MeV} = 2 \cdot 10^8$ eV, which is equivalent, *if* we assume Lorentz Invariance to hold. This is rather easy for experimentalists, it was done already in the 1950s, so Greisen, Zatsepin and Kuz'min could refer to the result. Also the computation of the energy loss of an ultra high energy proton under photopion production that we mentioned in Section 3 (about 20 %) is based on Lorentz Invariance.

⁸ This property is different from the non-relativistic “Galilean transformation”, which was used until the beginning of the 20th century. That is a simplification, where any observer perceives the same distance, time interval etc. (the boost factor is set to $\gamma = 1$). It corresponds to setting the speed of light to $c = \infty$, which is a good approximation as long as the speed v under consideration is much slower, $v \ll c$, cf. Figure 6.
⁹ The now operating Large Hadron Collider (LHC, also at CERN) attains even higher energies, but for particles and nuclei which are much heavier than the electron and positron, so LEP still holds the *speed* world record in laboratories.

However, the transformation factor between a proton at rest, and with an energy around E_{GZK} , amounts to $\gamma = E_{\text{GZK}} / m_p \approx 10^{11}$, far beyond the boost factors that have ever been tested ($m_p \approx 9.38 \cdot 10^8$ eV is the proton mass). A proton with energy E_{GZK} moves with 99.9999999999999999995 % of the speed of light. So could Lorentz Invariance be an excellent approximation up to $\gamma \approx 10^5$, which still requires some modification at much larger γ values?

The possible *absence* of the GZK cutoff for cosmic rays could be a hint for this scenario. This question has to be addressed experimentally, and it is a fascinating opportunity to probe our established theory under truly extreme conditions, which are by no means accessible in our laboratories.

VI. THE PHENOMENOLOGICAL SITUATION TODAY

In the beginning of the 21st century the phenomenological situation changed, when the HiRes (High Resolution) Observatory in Utah (USA) started to dominate the world data [5]. Its results favor the conclusion *opposite* to AGASA, *i.e.* the “boring scenario” where the GZK cutoff is confirmed, no new physics is needed, and Djokovic’s service is not challenged by cosmic protons. In the contrary, this would provide indirect evidence *for* the validity of Lorentz Invariance, even at such tremendous speed transformations.

How could this discrepancy with AGASA and other observatories occur? A possible explanation is that they used different techniques: AGASA, Yakutsk and Haverah Park detected on ground secondary particles of powerful air showers. As a rough rule, such a shower involves (in its maximum) about 1 particle for each GeV of the primary particle (1 GeV = 10^9 eV), so that a 10^{20} eV proton can give rise to a shower of up to 10^{11} secondary particles (in this respect, the colored billiard balls cannot compete). After detecting some of these secondary particles, fast computers and sophisticated numerical methods are used to reconstruct the most likely point where the shower took its maximum. That indicates the nature of the primary particle (or nucleus) —the heavier it is, the higher the shower maximum. This numerical reconstruction of the air shower evolution also provides an estimate for the primary particle energy —obviously with some uncertainty.

On the other hand, HiRes monitored a weak bluish or ultraviolet “fluorescence light” (see Figure 2). It originates in nitrogen molecules in the air, which are excited by an air shower, and which emit this light when returning to their ground state. The virtue is that the shower is observed at an early stage, so it does not need to be reconstructed afterwards numerically. On the other hand, this observation is only possible in nights without clouds and without much moon shine, hence it provides only modest statistics.

In order to settle this controversy, the *Pierre Auger Observatory* in Argentina now combines *both* techniques [6]. On ground 1600 water tanks detect secondary particles and capture many

high energy cosmic rays. Their installation was completed in 2008, and its data set now exceeds by far the previous world statistics. Moreover 24 fluorescence telescopes search for “golden events” which are observed by both systems; they are very helpful in verifying the estimate for the primary particle energy. Thus the systematic error is around 22 %, which is harmless in this business, where one deals with magnitudes. Up to now the Pierre Auger Observatory has accumulated a lot of data, in particular it has identified well over 100 primary particles with energies close to or above E_{GZK} . However, even with these new data the statistics is still not sufficient for an ultimately conclusive answer to the question if there really is a GZK cutoff for the energy of cosmic rays. We add a short discussion in the Appendix.

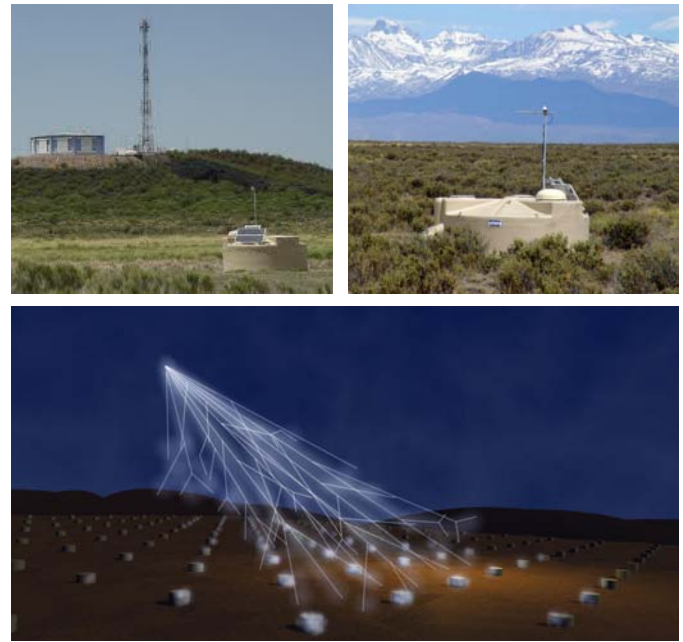


Figure 7: Images of the Pierre Auger Observatory in the “Pampa Amarilla” (Yellow Prairie) of the province of Mendoza, Argentina. It is now the dominant observatory in the search for ultra high energy cosmic rays. The collaboration involves almost 500 scientist in 19 countries. Above, on the left: one of the 24 fluorescence telescopes (on the hill), with cameras monitoring the weak bluish light that an air shower emits. Above, on the right: a cylindrical tank, dark inside, with 12 000 l of water, able to detect secondary particles. 1600 such tanks are spread over an area of 3000 km, on a triangular grid with spacing 1.5 km, in order to capture multiple secondary particles of a powerful air shower. Below: an artistic illustration.

VII. OUTLOOK

New experiments are in preparation, such as JEM-EUSO (Japanese Experiment Module – Extreme Universe Space Observatory) or OWL (Orbiting Wide-angle Light-collectors): now the idea is to observe the air shower formation from above, *i.e.* from satellites, which should provide more precise information. They will monitor the showers from the beginning, without being obstructed by clouds.

Hopefully this will at last answer the outstanding question about the existence of the GZK cutoff, which has fascinated

scientists for almost half a century [4]. Then we should finally know whether or not our established physical framework—with Lorentz Invariance as a cornerstone—needs to be revised, and whether or not cosmic protons can compete with services, or even smashes, in a professional tennis game.

I am indebted to Alberto Güijosa, Marco Panero and Uwe-Jens Wiese for useful comments, and to Aline Guevara for her help with the figures. A shorter version of this article in Spanish, with co-author Angélica Bahena Blas, is accepted for publication in CIENCIA, Revista de la Academia Mexicana de Ciencia.¹⁰

APPENDIX: THE FLUX OF ULTRA HIGH ENERGY COSMIC RAYS

The Pierre Auger Observatory operated in part since 2003. In 2007 it released preliminary results, which supported the scenario advocated by HiRes: the GZK cutoff seemed to be confirmed, although a number of new super GZK events were found.

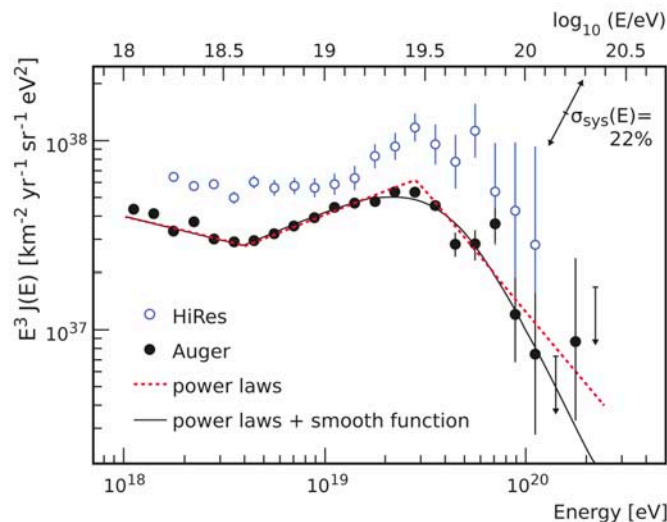


Figure 8: The flux of cosmic rays in the ultra high energy regime, multiplied by the factor E^3 (where E is the energy), according to the Observatories HiRes and Pierre Auger [6].

However, meanwhile the Pierre Auger Observatory has accumulated more and more statistics, and the conclusion about the ultra high energy cosmic flux is still not really compelling. Some excess—compared to the $1/E^3$ rule—is clearly observed just above $4 \cdot 10^{18}$ eV, see Figure 8. Above $3 \cdot 10^{19}$ eV $\approx E_{\text{GZK}}$ the flux drops quite sharply, which can be regarded as evidence for the “boring scenario” (confirmation of the GZK cutoff). However, if we extrapolate the flux from $E < 4 \cdot 10^{18}$ eV into the super-GZK regime, it is well compatible with the data. Hence this excess could also be viewed as a limited pile-up (as it also occurs at lower energies, see Figure 3), while the power law over an extended energy range (up to deviations) might still be in business.

Therefore, even with the new data by the Pierre Auger Observatory, the statistics is still too poor for a final answer to the question if there really is a GZK cutoff for the energy of cosmic rays. Moreover, even if an extraordinary flux suppression above E_{GZK} will be confirmed (which is currently considered the more likely scenario), one could still question if this is really a consequence of the GZK effect, or if the sources do hardly provide cosmic rays with even higher energy.

- [1] K. Greisen, Phys. Rev. Lett. **16**, 784 (1966). G. T. Zatsepin and V. A. Kuz'min, Sov. Phys. JETP Lett. **4**, 78 (1966).
- [2] T. Takeda *et al.*, Phys. Rev. Lett. **81**, 1163 (1998).
- [3] S. R. Coleman and S. L. Glashow, Phys. Rev. D **59**, 116008 (1999).
- [4] W. Bietenholz, Phys. Rept. **505**, 145 (2011).
- [5] HiRes Collaboration, Phys. Rev. Lett. **100**, 101101 (2008).
- [6] Pierre Auger Collaboration, Phys. Lett. B **685**, 239 (2010).

CELEBRANDO CON ECUACIONES



Celebrando con ecuaciones. A la izquierda, el presidente de la Sociedad Cubana de Física, Augusto González, trabajando sobre las “ecuaciones de la Física en Cuba” ante el entusiasta auditorio que aparece en la foto de la derecha, el día 10 de enero de 2014. (Fotos: O. de Melo).

El 10 de enero de 2014 se celebró por vez primera el día de la física cubana (en conmemoración de la creación de la carrera de Física en Cuba en el marco de la Reforma Universitaria de 1962) con un interesante encuentro en el que participaron estudiantes de grado duodécimo que estudian en la Universidad de La Habana para ingresar en la carrera de Física, y algunos físicos cubanos de experiencia.

El profesor titular de la Facultad de Física Osvaldo de Melo presentó al doctor Augusto González, presidente de la Sociedad Cubana de Física, que procedió a describir, tiza en mano, lo que para él constituyen “La ecuaciones de la Física en Cuba”, que intentan describir las evoluciones temporales del número neto de físicos “en activo” que trabajan en Cuba, y el número de artículos científicos que éstos han producido. Las soluciones de las ecuaciones, en dependencia de los parámetros involucrados, podrían implicar un estancamiento o un aumento del número de artículos publicados –que se podría interpretar como escenarios negativos o positivos, respectivamente, para la Física en nuestro país. Si se introdujeran en las ecuaciones

valores realistas de parámetros como el *número de físicos “activos” que “entran al sistema” cada año, el número de artículos por año producidos por cada físico, etc.*, podríamos predecir el derrotero de la Física en Cuba en los próximos años con la ayuda de las ecuaciones mencionadas.

Utilizando estos argumentos como motivación, el presidente de la Sociedad Cubana de Física propició un interesante intercambio de ideas con los estudiantes presentes los cuales, por ejemplo, demostraron su inclinación por graduarse de Física en Cuba, completar eventualmente un grado científico en el extranjero, para luego volver a su país a ejercer como físicos.

La actividad, que tuvo lugar en el edificio “Varona” de la Universidad de La Habana, concluyó con un pequeño brindis consistente en refresco gaseado y golosinas.

E. Altshuler

NUESTRA FÍSICA EN NOTICIAS

FÍSICOS AL DEBATE

“Aunque suene un tanto grandilocuente, no por ello es menos cierto que este libro contribuye a desempolvar una tradición tan vieja como la existencia misma de la Real Academia de Ciencias Médicas, Físicas y Naturales de La Habana, fundada hace más de 150 años: la tradición del debate.”

Así comienza el prólogo del libro “Medicina sin apellidos”, lanzado en la Universidad de La Habana el pasado miércoles 19 de febrero, como parte de las actividades de la Feria Internacional del Libro de 2014. El libro, coordinado por un físico (O. de Melo), contó con las contribuciones de otros 4 colegas (A. González, R. Mulet, E. Estévez y E. Altshuler

como prologuista), además de otros científicos cubanos provenientes de diferentes ramas del saber.

La editorial “Universidad de La Habana” sacó a la luz la obra, que refleja en sus páginas el debate entre ciertas tendencias pseudocientíficas que invaden la medicina actual, y los defensores del método científico. En sus páginas no se encontrará el tradicional contrapunteo “preparado” o “edulcorado”: por el contrario, el lector se colocará ante una verdadera confrontación, directa e irreconciliable, entre puntos de vistas diferentes defendidos por uno u otro autores. Por la profundidad de las ideas tratadas en torno al método científico, así como su elegante y ágil estilo, creemos

que la obra puede constituir un material de cabecera para la enseñanza de las ciencias a todos los niveles, especialmente el superior.

E. Altshuler



Los físicos a la vanguardia del pensamiento científico. El 19 de febrero del 2014 se lanzó, en los bajos de la Biblioteca Central “Rubén Martínez Villena”, de la Universidad de La Habana, el libro “Medicina sin apellidos” (panel derecho), coordinado por el profesor Osvaldo de Melo, de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana. En la foto de la izquierda, de izquierda a derecha, están: Maielis González Fernández (editora del libro), El Dr. Francisco Rojas Ochoa, que realizó la presentación, y el coordinador de la obra, Osvaldo de Melo. (Fotos: E. Altshuler)

NUESTRA FÍSICA EN NOTICIAS

LOS MAGOS CELEBRARON EL CUMPLEAÑOS 135 DE ALBERT EINSTEIN

Hasta donde sabemos, nunca la Biblioteca Nacional “José Martí” había albergado un evento de la naturaleza del que tuvo lugar los días 13 y 14 de marzo de 2014 –aniversario 135 del natalicio de Albert Einstein. Se trata del Show Tecnológico “Los Magos”, que sirvió como preámbulo al Simposio y Congreso de la Sociedad Cubana de Física que tendría lugar la semana siguiente. El Show –una iniciativa del presidente de la Sociedad Cubana de Física Augusto González, y organizado por Lorenzo Rodríguez– consistió en la presentación de 11 experimentos accesibles al público en general, que reflejan resultados de nuestros físicos con aplicaciones directas o potenciales a diversos ámbitos de la industria o de la salud. Los experimentos, sus presentadores y las instituciones correspondientes se listan a continuación:

VIBROT: Converting vibration into rotation by friction

E. Altshuler, F. Tejera y G. Sánchez
[Facultad de Física, Universidad de La Habana]

ZZ Microbicida para la purificación de agua.

Gerardo Rodríguez Fuentes e Inocente Rodríguez Iznaga
[IMRE, Universidad de La Habana]

Sistema MADIP: Análisis Morfométrico Mediante el Procesamiento Digital de Imágenes

Roberto Rodríguez Morales
[ICIMAF, La Habana]

Simulación y Modelación Computacional utilizando Procesadores Gráficos

Rolando Rodríguez Fernández (1,2), Ania de la Nuez Veulens (1), Nelia López Marín (2), Carlos Moreno Crespo (2), Gustavo Sánchez Colina (2), Eric Castro Álvarez(1), Patricia Gutiérrez Zayas-Bazán (2), Karla Gutiérrez Zayas-Bazán (2)

[(1) Departamento de Medicina Computacional, Instituto de Nefrología, La Habana, (2) Facultad de Física, Universidad de La Habana]

Lanceta Láser y otros equipos del IMRE

José Luis Cabrera, Osmel Cruzata, Adalio Borges, Bradies Lambert, Alfredo Ponce, Ivette Ravelo
[IMRE, Universidad de La Habana]

The use of low-intensity ultrasound to enhance tissue repair in Orthopaedics: An overview

O. Rodríguez
[ICIMAF, La Habana]

Equipos ultrasónicos

Ernesto Carrillo Barroso (1), Antonio Jiménez Cañas (1), Eduardo Moreno Hernández (1), Raúl Arteché Díaz (2)
[(1) ICIMAF, La Habana, (2) CEADEN, La Habana]

Desarrollo de un Generador de Señales, usando un PSoC, para una Instalación de obtención de Lazos de Histéresis Ferroeléctrica

Doris Rivero Ramírez (1), Yoel Jenez Magana (2) Jorge Portelles Rodríguez (2), Adrian Rivero Balseiro (1)
[(1) Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (Instec), La Habana, (2) Facultad de Física, Universidad de La Habana]

Viendo átomos en Cuba

Javier Martínez, Mayra Hernández
[IMRE, Universidad de La Habana]

Equipos Láser de Baja Potencia para aplicaciones medicas, producidos por el CEADEN

Alina Orellana Molina, Adel Hernández Díaz, Omar Morales Valdez, Pedro Larrea Cox, Sandra Fernández Yanes
[CEADEN, La Habana]

Equipos BIOFIE modelos BE100 y BE200 para aplicación de terapia con luz

Carlos Alberto Corcho Corcho, Ruben Herrera Rodriguez, Alejandro Manuel Pérez García
[CUJAE, La Habana]

Ernesto Ocaña, Isavel Jimeno y Jose Luis Fariñas, que fueron curados por Roberto Valdés. Entre ellos “El Mago”, de la autoría de Alicia de la Campa, sirvió como inspiración para poner título al Show.

En paralelo con el show, se realizó una mini exposición de cuadros alegóricos a la figura de Albert Einstein, de la autoría de varios artistas cubanos: Adigio Benítez, Alicia de la Campa,

E. Altshuler



Show tecnológico “Los Magos”. (a) A las 10 AM del 13 de marzo de 2014, Lorenzo Rodríguez (CEADEN) y Augusto González (Presidente de la Sociedad Cubana de Física) inauguran el show Tecnológico “Los Magos”, que tuvo lugar en la Biblioteca Nacional “José Martí”. (b) Un equipo del ICIMAF mostró un dispositivo para detectar defectos en tuberías metálicas a través del ultrasonido, con características altamente competitivas, que utiliza materiales piezoeléctricos elaborados en Cuba. (c) Rolando Rodríguez (Instituto de Nefrología) ilustra el uso de un sistema de visualización 3D utilizado en la simulación computacional de sistemas biológicos de interés para la medicina. (d) Gustavo Sánchez (Facultad de Física de la Universidad de La Habana) explica cómo funciona un VIBROT, dispositivo mecánico original capaz de convertir vibraciones en un movimiento de rotación. (e) El show incluyó una pequeña muestra de cuadros de autores cubanos inspirados en la figura de Albert Einstein, curada por Roberto Valdés. (Fotos: E. Altshuler)

REALIZADA SEGUNDA OLIMPIADA NACIONAL UNIVERSITARIA DE FÍSICA

El pasado 14 de marzo se realizó la segunda Olimpiada Nacional de Física Universitaria (ONUF), convocada por la Facultad de Física de la Universidad de la Habana y La Sociedad Cubana de Física. La Olimpiada se realizó de manera simultánea en diferentes Universidades del país. En esta segunda edición participaron 49 estudiantes de 8 universidades cubanas.

La premiación se realizó el jueves 10 de Abril de 2014 a las 2:00 pm en los bajos de la Biblioteca Central de la Universidad de la Habana. Los ganadores de medallas recibieron un premio y un certificado acreditando este resultado. Rubert Martín Pardo, de 4^{to} año de la Facultad de Física de la UH, obtuvo el primer lugar absoluto por lo que recibió un premio especial de la Sociedad

Cubana de Física. Las platas fueron a manos de Yoandris Vielza (5^{to} de licenciatura en Física de la UH), Danyer Pérez (3^{ro} de licenciatura en Física Nuclear del INSTEC), Alfredo González (5^{to} de licenciatura en Física de la UH), Alejandro L. Alfonso (1^{ro} de licenciatura en Física de la UCLV). El bronce fue obtenido por Denys Yen Arrebató (4^{to} de licenciatura en Física Nuclear del INSTEC), y obtuvieron menciones Rayner Hernández (3^{ro} de licenciatura en Física Nuclear del INSTEC) y Alejandro Ramos (3^{ro} de licenciatura en Física, de la UH).

Directiva
Sociedad Cubana de Física.

CELEBRASE EL I TALLER DE ENSEÑANZA DE LA FÍSICA EN LA UNIVERSIDAD DE ORIENTE

Convocado por el Departamento de Física Aplicada de la Facultad de Ingeniería Mecánica de la Universidad de Oriente (UO) con el auspicio del Programa VLIR encaminado al fortalecimiento Institucional de la UO para el desarrollo sostenible de la región oriental de Cuba, se celebró el pasado 2 de mayo de 2014 el "I Taller de enseñanza de la Física". Participaron unos 60 profesores e investigadores en el campo de la física de diferentes entidades de la Universidad de Oriente: el propio Departamento de Física Aplicada (DFA) (coordinador de la enseñanza de la Física General en las carreras de Ingeniería), el Departamento de Física de la Facultad de Ciencias Naturales (DF) (coordinador del programa de la Licenciatura en Física), el Centro de Biofísica Médica (CBM) y el Centro Nacional de Electromagnetismo Aplicado (CNEA).

La apertura del taller se realizó por el M. Sc. César Mesa Navarro, actual Jefe de Departamento de Física Aplicada, y el Dr. Cs. Homero Calixto Fuentes González, Jefe Fundador de dicho Departamento, quienes realizaron un recuento histórico del Departamento, desde su fundación hasta el presente, con énfasis en la política seguida para la formación de doctores.

Se entregaron diplomas de reconocimiento al Dr. Cs. Homero Calixto Fuentes González, la Dra. Lizette Pérez Martínez y el Dr. Pedro Muné Bandera, por su loable labor como profesores, jefes del Departamento de Física Aplicada y en otras responsabilidades académicas, como Decanos, Vicedecanos, Vicerrectores, etc. en la Universidad de Oriente. Aunque no estuvieron presentes, fueron igualmente reconocidos los Doctores Pedro Horruitiner Silva, Director de Formación del Profesional del M.E.S. y Héctor León Ramírez, quienes pertenecieron al claustro del Departamento de Física Aplicada desde su fundación.

Las conferencias inaugurales fueron dictadas por el Dr. C. Faustino Leonel Repilado Ramírez y el M. Sc. Luís Manuel Méndez Pérez, refiriéndose el primero a "El historicismo en la enseñanza de la Física" y el segundo realizando una presentación del libro «The History of Physics in Cuba», editado por la Springer Publisher en la Series Boston Studies in the Philosophy and History of Science, editado por Ángelo Baracca, Helge Wendt y Jurgen Renn.

En el taller se presentaron 20 ponencias distribuidas en dos comisiones y 4 carteles, todos relacionados con las experiencias de los participantes en la enseñanza de la Física en la Universidad de Oriente.

También se convocó a la realización del II Taller en mayo del año próximo, con la perspectiva de extenderlo a la enseñanza preuniversitaria e instituciones de educación superior de Santiago de Cuba y demás provincias orientales.



Foto de grupo donde aparecen algunos de los participantes en el I Taller de Enseñanza de la Física en la Universidad de Oriente

L. M. Méndez Pérez
Departamento de Física, Facultad de Ciencias Naturales,
Universidad de Oriente

LETTER TO THE EDITOR: ON A NON-CONTRADICTIONARY BEGINNING OF THE UNIVERSE

CARTA AL EDITOR: SOBRE UN COMIENZO DEL UNIVERSO NO-CONTRADICTIONARIO

F. L. FALCÓN

Materials Science and Technology Institute, University of Havana. falcon@imre.oc.uh.cu

If you want to see the invisible, carefully observe the visible.

Talmud

A review of the different models about the origin of the universe under discussion nowadays shows that they don't resolve the contradiction between the universe with a beginning versus the universe having existed forever in the past.

However, there is a possible solution to this contradiction which was surmised in the fifth century BC by Zeno of Elea. One of his famous paradoxes states that if we want to cover any distance previously established with steps that are always a fraction of the remaining distance to cover, we never reach the end. In other words, it would be necessary to make countless steps to cover the total distance.

Let's take a look at the main structural states of matter arisen during the evolution of the universe and the estimated times when these changes have occurred [1]:

Time of events	Time lapses relations
10^{-43} s: non-differentiated forces	10^{-24}
10^{-34} s: elementary particles soup	10^{-9}
10^{-10} s: formation of protons and neutrons	5.55×10^{-13}
3 min: atomic nucleus	1.93×10^{-11}
300 000 years: atoms	3×10^{-4}
10^9 years: stars (with the subsequent formation of atoms more complex than hydrogen)	

The time lapses relations in the table shown above point out the quotient between the time elapsed from $t = 0$ to the occurrence of event denoted in the corresponding line, and the time elapsed from $t = 0$ to the occurrence of the next event. As we can see, these relations exceedingly fulfill Zeno's paradox. The overall tendency to retardation of changes in the state of the universe could be explained by taking into account the combination, on the one hand, of its ever existing expansion and, on the other, the limited value of the velocity of interactions between its different constituents, i.e., the

velocity of light in the vacuum, c .

This result suggests a model of the universe with a beginning in time but with infinite states of matter in its past. Such model reconciles the contradiction mentioned at the beginning of this paper, by fulfilling both requirements: firstly, the law of conservation of matter and, secondly, the experimental data suggesting the existence of a beginning in time for the known universe.

In Table I we see that elementary particles arose at approximately 10^{-34} seconds later than $t = 0$ and, taking into account that our reasoning was reached by paying attention to the data on the evolution of baryonic matter, it raises the question whether Zeno's paradox would also be fulfilled for $t < 10^{-34}$ s.

In this direction, there isn't any physical argument against the assumption that the expansion of the universe holds for all kinds of matter (mass or energy) and therefore, this process must have taken place for $0 < t < 10^{-34}$ s as well. In this pre-baryonic universe with pure undulatory behavior, the oscillation frequency of its states necessarily depends on the universe volume, in a similar way that the pitch of a string musical instrument depends on string size, according to the relation $f \propto 1/l$, where f is the oscillation frequency and l the length of the string.

For times nearer to $t = 0$, that is, for smaller volumes of the universe, higher oscillation frequencies of the energy states will be expected and consequently, smaller duration of each of such states, fulfilling Zeno's paradox. As expressed in [2] "the universe looks like a very peculiar book. As we flick through it to get back to the beginning, its pages get thinner and thinner. An infinity of pages need to be flicked through to get to the start of the beginning, and we can never read the author's preface."

The early universe was a quantum-relativistic system and, for this reason, time and spatial dimensions were not exactly determined, but the relation of frequency of states, time and spatial dimensions corresponding to an expansion process must have taken place in order to fulfill the causality principle. Following what have been exposed before in this letter, there exists the possibility, inferred from logical and physical facts, that the universe had a beginning in time and, at the same time, a sequence of infinite states toward the past, obeying Zenó's paradox with the consequent elimination of one of the fundamental contradictions in cosmology.

[1] E. Chaisson, *Cosmic Evolution: The rise of Complexity in Nature*, (Harvard University Press, 2001).

[2] J. P. Petit and G. d'Agostini, paper presented at the *International Meeting on Variational Techniques (CITV)*, Le Mont Dore, 2007.

