

FÍSICA

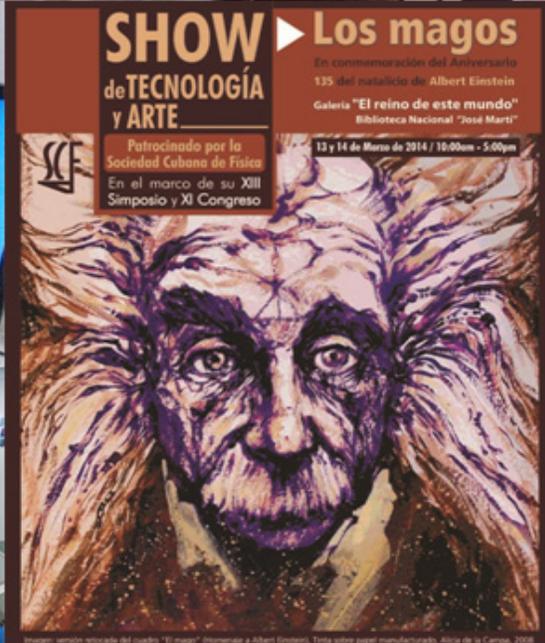
REVISTA CUBANA DE FÍSICA

FÍSICA

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

VOL. 31 No 1E
DICIEMBRE, 2014

XIII SIMPOSIO Y XI CONGRESO DE LA SOCIEDAD CUBANA DE FÍSICA



NÚMERO ESPECIAL

Portada: Collage de fotos de el Show de Tecnología y Arte "Los Magos" patrocinado por la Sociedad Cubana de FBiblioteca Nacional "José Martí", 13 y 14 de marzo de 2014.

EDITOR

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

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

EDITORES INVITADOS

A. CABO
ICIMAF, La Habana
cabo@icimaf.cu

O. DÍAZ-RIZO
Instec, La Habana
odrizo@instec.cu

M. D. DURRUTHY
ICIMAF, La Habana
dolores@icimaf.cu

L. HERNÁNDEZ-TABARES
CEADEN, La Habana
lorenzo@ceaden.edu.cu

A. IRIBARREN
IMRE, Universidad de la Habana, La Habana
augusto@imre.oc.uh.cu

A. LÓPEZ-DÍAZ
Dpto. Medicina Nuclear, Hosp. "Hermandades Amiejeiras", La Habana
jmn@hha.sld.cu

J. J. LLOVERA-GONZÁLEZ
CUJAE, La Habana
llovera@electrica.cujae.edu.cu

A. MÉNDEZ-BERHONDO
IGA, La Habana

J. A. RODRÍGUEZ
Facultad de Física, Universidad de la Habana,
La Habana
jar@fisica.uh.cu

DISEÑADORES

DANIEL DÍAZ
ERNESTO ANTÓN
E. ALTSHULER

TODOS LOS ARTÍCULOS EN FORMATO-e:
www.fisica.uh.cu/biblioteca/

E5 COORDENADAS

UN VISTAZO AL XIII SIMPOSIO Y XI CONGRESO DE LA SOCIEDAD CUBANA DE FÍSICA
A. González

E7 LA ECUACIÓN DE LA FÍSICA EN CUBA

A. González

E8 ARTÍCULOS ORIGINALES

ESTRUCTURAS DE $Cd_xZn_{1-x}Te$ CON COMPOSICIÓN GRADUAL
[$Cd_xZn_{1-x}Te$ STRUCTURES WITH GRADRED COMPOSITION]

A. Domínguez, K. Gutierrez Z-B, G. Contreras-Puente, Escobosa, S. Gallardo-Hernández,
J. C. González y O. de Melo

E12 ESTUDIO COMPUTACIONAL DE LAS PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y VIBRACIONALES DE LAS ZEOLITAS CON TOPOLOGÍA MFI A ALTA PRESIÓN

[COMPUTATIONAL STUDY ON STRUCTURAL AND VIBRATIONAL PROPERTIES OF ZEOLITES WITH MFI
TOPOLOGY AT HIGH PRESSURE]

C. Torres, E. Navas y J. Gulín-González

E16 SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE NANOPARTÍCULAS DE MAGNETITA PARA LA REMOCIÓN DE Cu^{2+} DE AGUAS RESIDUALES

[SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF MAGNETITE NANOPARTICLES FOR REMOVING Cu^{2+}
FROM WASTEWATER]

E. Cruz, R. Martínez, J. Jiménez, S. Díaz y F. Calderón

E19 LA EMISIÓN MAGNÉTICA BARKHAUSEN EN EL ACERO AISI 1045 DEFORMADO PLÁSTICAMENTE CON RODILLO

[THE MAGNETIC EMISSION BARKHAUSEN IN THE STEEL AISI 1045 DEFORMED PLASTICALLY WITH
ROLLER]

G. Moreno, J. Capó, T. Fernández y D. Ayarde

E22 TRANSICIONES DE FASES Y DEL GAP DIRECTO-INDIRECTO INDUCIDAS POR PRESIÓN EN MgO : ESTUDIO MEDIANTE DFT

[TRANSITION OF PHASES AND THE DIRECT-INDIRECT GAP INDUCED UNDER PRESSURE IN
 MgO : A STUDY USING DFT]

G. P. Abdel-Rahim, J. Arbey-Rodríguez y M. G. Moreno-Armenta

E24 PREDICCIONES Y RESULTADOS EXPERIMENTALES DE LA CARACTERIZACIÓN MAGNÉTICA Y ESTRUCTURAL DE LA BaM DOPADA CON UN CATION EN LOS SITIOS DEL HIERRO

[PREDICTIONS AND EXPERIMENTAL RESULTS OF MAGNETIC AND STRUCTURAL
CHARACTERIZATION OF BaM DOPPED WITH ONE CATION IN THE FE SITES]

A. Mariño-Castellanos, C. Pupo-Palma y J. Matilla-Arias

E26 INTERACCIÓN DE LA MORDENITA CON SALES CUATERNARIAS DE AMONIO

[MORDENITE INTERACTION OF QUATERNARY AMMONIUM SALTS]

M. Hernández, Y. Costa y M. H. Farías

E28 FIRST STAGES OF POROUS MATERIALS SYNTHESIS STARTING FROM CLINOPTILOLITE: MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS

[PRIMEROS ESTADIOS DE LA SÍNTESIS DE MATERIALES POROSOS A PARTIR DE
CLINOPTILOLITA: SIMULACIONES DE DINÁMICA MOLECULAR]

Y. Machado-Batista, A. Rivera, L.J. Álvarez and A. Lam

E31 SEMICLASSICAL MODELING OF FINITE-PULSE EXCITATION EFFECTS ON THE PREDISSOCIATION DYNAMICS OF NaI

[MODELACIÓN SEMICLÁSICA DE LOS EFECTOS DE LA EXCITACIÓN MEDIANTE PULSOS
DE DURACIÓN FINITA SOBRE LA DINÁMICA DE PREDISOCIACIÓN DE NaI]

A. Martínez Mesa y P. Saalfrank

- E35 **CARACTERIZACIÓN COMPUTACIONAL DE LA DIFUSIÓN EN UN SISTEMA UNIDIMENSIONAL DE PARTÍCULAS INTERACTUANTES EN RÉGIMEN HIDRODINÁMICO**
[COMPUTATIONAL CHARACTERIZATION OF ONE DIMENSIONAL DIFFUSION OF A SYSTEM OF PARTICLES ON HYDRODYNAMIC REGIME]
E. Navas-Conyedo, C. M. Pérez-Reyes, C. Torres-Pupo, Y. Costa-Marrero, J. Gulín González
- E39 **STUDY OF THE CIS-TRANS PHOTOISOMERIZATION IN A MODEL POLYATOMIC MOLECULE**
[ESTUDIO DE LA FOTOISOMERIZACIÓN *CIS-TRANS* EN UNA MOÉCULA POLIATÓMICA MODELO]
F. Rodríguez-Hernández, A. Martínez Mesa y L. Uranga Piña
- E42 **ACERCA DE UN ANÁLOGO TRIDIMENSIONAL DE LA FÓRMULA INTEGRAL DE CAUCHY Y SU APLICACIÓN A LA ELECTROSTÁTICA**
[ON A TRIDIMENSIONAL ANALOGUE OF CAUCHY INTEGRAL FORMULA AND ITS APPLICATION TO ELECTROSTATICS]
R. Ávila-Ávila, R. Abreu-Blaya y J. Bory-Reyes
- E44 **UNA COMPARACIÓN ENTRE LOS RETRASOS DE TIEMPO DE CARÁCTER RELATIVISTA Y TERMODINÁMICO**
[COMPARISON BETWEEN DELAY OF TIME OF RELATIVISTIC AND THERMODYNAMICAL CHARACTER]
L. Pérez Tamayo
- E47 **INSTALACIÓN AUTOMATIZADA PARA MEDIR LAS CARACTERÍSTICAS DEL LAZO DE HISTÉRESIS EN MATERIALES FERROELÉCTRICOS**
D. Rivero-Ramírez, J. Portelles-Rodríguez, A. Rivero-Balceiro, Tran Duc Bac, M. Díaz-Castro, J. Siqueiros-Beltrones, F. J. Quiles-Latorre, J. I. Benavidez-Benítez
- E51 **EVALUACIÓN DE LA CONFORMIDAD DEL APARATO DE VICAT**
[CONFORMITY ASSESSMENT OF THE VICAT APPARATUS]
F. Buzón y A. Hernández
- E54 **EVOLUCIÓN DEL PROCESO DE FOTOSÍNTESIS DESPUÉS DEL IMPACTO DEL ASTEROIDE DE CHICXULUB**
[PHOTOSYNTHETIC PROCESS EVOLUTION AFTER THE IMPACT OF THE CHICXULUB ASTEROID]
Martín-González y R. Cárdenas-Ortiz
- E57 **SIMULACIÓN DE COMPUERTAS LÓGICAS CUÁNTICAS UNIVERSALES MEDIANTE UN MODELO DE CÓDIGO TÓRICO**
[SIMULATION OF UNIVERSAL LOGIC QUANTUM GATES BY USING A TORIC CODE MODEL]
P. MARÍN y J. MAHECHA
- E61 **ESTRATEGIAS DE ENSEÑANZA PARA UN APRENDIZAJE SIGNIFICATIVO EN LA FÍSICA EXPERIMENTAL**
[STRATEGIES OF TEACHING FOR A SIGNIFICANT LEARNING IN EXPERIMENTAL PHYSICS]
A. D. Rodríguez
- E66 **INSTRUMENTOS PARA LA PREPARACIÓN DE ESTUDIANTES DE FÍSICA EN EL PREUNIVERSITARIO**
[INSTRUMENTS FOR THE PREPARATION OF PHYSICS STUDENTS IN HIGH SCHOOL]
J. Mora
- E69 **MODELO DE LOS DOS CUERPOS: SU ROL EN EL DESARROLLO HISTÓRICO DE LA FÍSICA Y SU USO EN LA ENSEÑANZA DE LA FÍSICA GENERAL**
[THE TWO BODY MODEL: ITS HISTORICAL IMPORTANCE IN THE DEVELOPMENT OF PHYSICS AND ITS USE IN GENERAL PHYSICS TEACHING]
L. M. Méndez Pérez, L. A. Matos y E. J. Roca Oriá
- E71 **LOS LABORATORIOS-PROYECTOS COMO ESTRATEGIA DIDÁCTICA A TRAVÉS DEL DESARROLLO DE COMPETENCIAS INVESTIGATIVAS**
[PROJECT LABORATORY AS A DIDACTIC ESTRATEGY THROUGH THE DEVELOPMENT OF COMPETENCIES IN RESEARCH]
M. A. Batista-Zaldívar, P. A. Mariño-Castellanos y S. I. González-Bello

- E74 **LA SOCIEDAD CUBANA DE FÍSICA: CONTRIBUCIÓN A LA SUPERACIÓN DE PROFESORES UNIVERSITARIOS**
 [THE CUBAN SOCIETY OF PHYSICS: ITS CONTRIBUTION TO THE UPGRADING OF UNIVERSITY PROFESSORS]
 S. L. González, F. O. Machín y R. Ávila
- E76 **EL REDUCCIONISMO EN LA ENSEÑANZA DE LA FÍSICA VERSUS EL PENSAMIENTO DE LA COMPLEJIDAD**
 [THE REDUCTIONISM IN PHYSICS TEACHING VERSUS THE THOUGHT OF THE COMPLEXITY]
 D. de J. Alamino
- E79 **TAREAS INTEGRADORAS PARA POTENCIAR LAS RELACIONES INTERDISCIPLINARIAS ENTRE LAS ASIGNATURAS FÍSICA Y MATEMÁTICA EN DÉCIMO GRADO**
 [INCLUSIVE WORK TO ENHANCE THE INTERDISCIPLINARY RELATIONS BETWEEN PHYSICS AND MATHEMATICS SUBJECTS IN TENTH GRADE]
 Y. Marzo, M. Muramatsu, J. Gillarón, G. Moreno, S. González y E. Sánchez
- E82 **DETERMINACIÓN DE DEXTRANA EN AZÚCARES TÉCNICOS MEDIANTE EL SISTEMA CROMATOGRÁFICO CON DETECCIÓN POLARIMÉTRICA SCDP**
 [DEXTRAN DETERMINATION IN TECHNICAL SUGARS USING A CHROMATOGRAPHIC SYSTEM WITH AUTOMATIC POLARIMETRIC DETECTION SCDP]
 S. Naranjo, V. Fajer y C. W. Rodríguez
- E85 **TEMPERATURE DEPENDENT SEEDING EFFECTS ON CBD GROWN ZINC OXIDE NANORODS**
 [EFECTOS DE LA TEMPERATURA DE SEDIMENTACIÓN EN NANORODS DE ÓXIDO DE ZINC CRECIDOS POR CBD]
 L. Vaillant-Roca, A. Peukert, M. Wittmer, O. Almora-Rodríguez, A. Chanaewa, and E. von Hauff
- E87 **MEDICIONES DE DLTS EN CELDAS SOLARES POLICRISTALINAS A CAPAS DELGADAS DE CdTe/CdS**
 [DLTS MEASUREMENTS ON CdTe/CdS POLYCRYSTALLINE THIN FILMS SOLAR CELLS]
 O. Almora, L. Vaillant-Roca, J. C. Rimada y A. Bosio
- E90 **BIOAMPLIFICADOR CON ACOPLAMIENTO AC VS DC PARA DETECCIÓN DE ECG**
 [BIOAMPLIFIER WITH AC VS DC COUPLING TO MEASUREMENT ECG]
 J. A. Leyva-Cruz, E. S. Ferreira, R. M. N. Fagundes, A. V. Andrade-Neto, M. S. R. Miltão, A. S. Alves y M. E. Cano
- E92 **EFECTOS DE DIVERSOS SUSTRATOS SINTÉTICOS SOBRE LA FABRICACIÓN DE FILMES FINOS DE QUITOSANA/FTALOCIANINAS SINTETIZADOS USANDO LA TÉCNICA DE LAYER-BY-LAYER**
 [EFFECTS OF DIVERSE SYNTHETIC SUBSTRATES ON THE FABRICATION OF QUITOSAN/FTALOCIANINES THIN FILMS SYNTHESIZED USING THE LAYER-BY-LAYER TECHNIQUE]
 E. S. Ferreira, J. A. Leyva-Cruz, M. S. R. Miltão, A. S. Alves, A. V. Andrade-Neto, A. S. Ito
- E94 **DINÁMICA NO LINEAL EN PATRONES DE SPECKLE DURANTE LA TRANSMISIÓN DEL POTENCIAL DE ACCIÓN**
 [NONLINEAR DYNAMICS IN SPECKLE PATTERNS DURING THE TRANSMISSION OF ACTION POTENTIAL]
 J. J. Llovera-González, A. B. Moreno-Yeras, J. B. Cruz-Arencibia, R. L. Serra-Toledo, D. Soga y M. Muramatsu
- E98 **CORRECCIÓN DE INCLINACIÓN Y CURVATURA EN MICROSCOPÍA HOLOGRÁFICA DIGITAL**
 [Tilt and curvature correction in digital holographic microscopy] G.
 Palacios, F. Palacios, J. Ricardo, D. Palacios, M. Muramatsu, F. A. Monroy, J. Valin, Y. Calixto, R. Mut y G. Moreno

UN VISTAZO AL XIII SIMPOSIO Y XI CONGRESO DE LA SOCIEDAD CUBANA DE FÍSICA



El XIII Simposio de la Sociedad Cubana de Física (SCF) se desarrolló en predios de la Universidad de La Habana, del 17 al 20 de Marzo de 2014. El XI Congreso, por su parte, sesionó también en la Universidad en la mañana del 21 de Marzo.

Para garantizar las condiciones se acometieron pequeñas reparaciones en la Facultad de Artes y Letras, el IMRE, el INSTEC y la Facultad de Química, todas sedes del evento.

Previas al Simposio y conmemorando el 135 Aniversario del natalicio de Albert Einstein (14 de Marzo), se desarrollaron un conjunto de actividades.

Primeramente, en la Biblioteca Nacional tuvo lugar, los días 13 y 14 de Marzo, un Show de Tecnologías y Arte en el que se presentaron resultados de varias instituciones así como un conjunto de obras de la plástica cuyo tema principal era Einstein. En la portada de este número se ofrece un collage de imágenes del show.

La II Olimpiada Universitaria de Física sesionó el 14 de Marzo y fue organizada por la Facultad de Física de la Universidad de La Habana, liderando un grupo de otras universidades. Tuvo una buena acogida entre los estudiantes universitarios.

Un Concurso de Problemas sobre Energías Renovables fue organizado por la profesora Elena Vigil (Universidad de La Habana) y un grupo de colaboradores. Su premiación tuvo lugar en el marco del Congreso.

Además, se ofrecieron varios mini-cursos pre-Simposio donde participaron jóvenes físicos tanto cubanos como extranjeros, algunos incluyendo la realización de experimentos y cálculos computacionales.

Aunque se inscribieron muchos más, finalmente participaron en el Simposio 262 cubanos y 42 extranjeros, una cifra record para estos eventos.

Durante el Simposio se dictaron 17 Conferencias Plenarias, 2 Conferencias en la Tarde de Astronomía y Astrofísica, 9 cursos de 6 horas cada uno, 20 Presentaciones Orales en 3 Sesiones Paralelas, el IV Taller Cuba Fotovoltaica con 8 presentaciones y 245 presentaciones en carteles.

Se entregó también la condición de Miembro de Mérito de la SCF al investigador ruso Anatoly E. Shabad, por su colaboración durante décadas con científicos cubanos.

Recibimos financiación del ICTP y del CLAF, que fue utilizada para reembolsar a participantes de Latinoamérica parte de los costos de transportación o alojamiento. El ICTP apoyó, además, la participación de A. Shabad en el evento.





Superconductividad para África y el Caribe. Entre los cursos pre-simposio se impartió uno de Experimentos Avanzados de Física, que incluyó un experimento para determinar la temperatura crítica de una cinta superconductora de alta temperatura. En la foto, tomada en el Laboratorio de Superconductividad situado en áreas del IMRE (Universidad de La Habana) se ve al profesor Alfo José Batista-Leyva (Instec), explicando el experimento a participantes de Santiago de Cuba, Angola y República Dominicana.

Los ingresos del Simposio, debido a las cuotas de inscripción de extranjeros y cubanos, donaciones del IMRE, la Facultad de Física, la Sociedad Cubana de Química y varios miembros de la sociedad y participantes extranjeros fueron ligeramente superiores a los gastos.

Este Simposio, pone fin a mi período como presidente de la Sociedad Cubana de Física (2011-2014), cuyo balance se puede consultar en la página web de la SCF <http://www.fisica.uh.cu/scf/index.php/en/reportes/83-reportes/236-informe-de-balance-2011-2014>.

Augusto González
Presidente SCF 2011-2014

LA ECUACIÓN DE LA FÍSICA EN CUBA

El Simposio que recién realizamos muestra los números más altos de participantes (304) y trabajos presentados (333) en los últimos 12 años. Estas son cifras alentadoras. Sin embargo, ¿indican ellas que entramos en una fase de recuperación?

Para hacer mas "cuantitativo" el análisis, les propongo examinar los datos de los últimos 3 simposios a la luz de "las ecuaciones que rigen la evolución de la Física en Cuba":

$$\frac{df}{dt} = b(t) - c(t) \quad (1)$$

$$\frac{dp}{dt} = a(t)f(t) \quad (2)$$

f es el número de físicos "en activo" en el país que, en nuestro caso, lo tomaremos como el número de participantes en los simposios. $b(t)$ es el número de nuevos ingresos a f en un año. Se compone básicamente de las graduaciones anuales de físicos en las universidades, aunque puede nutrirse de otras fuentes. Por el contrario, $c(t)$ es la tasa de deserciones, es decir, el número de personas que se mueven a trabajar en otras áreas de la ciencia y la economía, fallecen o emigran al exterior.

En la segunda ecuación, p es un indicador de resultados, que lo relacionaremos con los trabajos presentados en los simposios, sumándolo todo: conferencias, carteles, etc. $p(t)$ es una variable acumulativa, su incremento dp/dt es el número de trabajos nuevos en un año. Es completamente natural que este número sea proporcional a la cantidad de físicos en activo. La magnitud $a(t)$ es la tasa de productividad: trabajos presentados en un año por persona.

Algunos objetarán que las ecuaciones propuestas son demasiado simples y tienen toda la razón. Deberíamos, por ejemplo, incluir más indicadores para medir la Física (trabajos publicados en revistas, patentes, etc), incluir nuevos términos en las ecuaciones con comportamiento no lineal y otros. Sin embargo, en primera aproximación estas ecuaciones nos permiten un análisis cualitativo de como va la Física en Cuba.

Por ejemplo, ¿dónde aparece en las ecuaciones, si es que lo hace, la influencia del bajo salario de profesores y científicos? Pues, básicamente en $c(t)$, el índice de deserciones, aunque también en $a(t)$, la tasa de productividad. ¿Dónde se reflejan en las ecuaciones el entrenamiento de la fuerza laboral y las condiciones de trabajo? Básicamente en $a(t)$.

En la Fig. 1 se muestran los datos de los tres últimos simposios. El panel izquierdo se refiere a participantes cubanos, es decir, f . A pesar de que sabemos que la tasa de deserciones es altísima, a todas luces $b(t) > c(t)$ y el número de físicos en activo muestra una

tendencia al alza.

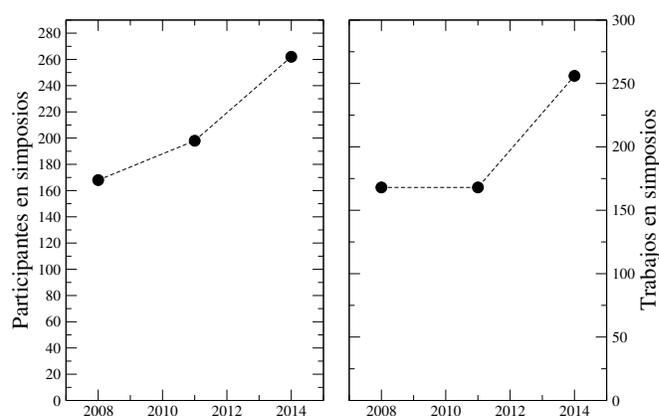


Figura 1. Número de participantes y de trabajos presentados en los tres últimos simposios de la SCF.

El panel derecho coincide, en esencia, con dp/dt . Aquí hemos incluido los trabajos en los cuales al menos uno de los autores es cubano. También se observa una tendencia al alza. Sin embargo, la tasa de productividad, que se obtiene de dividir por f , muestra un declive: $a(t)=1$ en el 2008, 0.85 en el 2011 y 0.98 en el 2014. ¿Qué está indicando? ¿Qué se está yendo gente capacitada? ¿Qué las condiciones de trabajo siguen muy deterioradas?

En conclusión, los datos de los últimos simposios y el modelo de juguete que hemos utilizado nos indican una tendencia de recuperación que pudiera estar sustentada en una alta tasa de nuevos ingresos, $b(t)$, por encima de las deserciones, $c(t)$. La tasa de productividad, $a(t)$, muestra, por el contrario, tendencia a decrecer.

En general, es necesario que, para medir cómo evoluciona la Física y toda la ciencia en nuestro país, tomemos el conjunto de índices que internacionalmente se utilizan como indicadores de eficiencia y los sigamos en el tiempo. Las medidas que se tomen para acelerar el desarrollo de la ciencia deberían justificarse, o corregirse, de acuerdo a su impacto sobre los índices de eficiencia. Yo sugeriría a nuestros funcionarios del MES, del CITMA, de las universidades y centros de investigación, encargados de política científica, adscribirse a este paradigma de "ciencimetría". E incluso utilizar modelos simples, como el expuesto, para ganar en comprensión sobre los elementos que influyen en la evolución de la ciencia.

Augusto González
Presidente SCF 2011-2014

En la Tabla I se presentan los parámetros de crecimiento de las muestras a estudiar. Las muestras se depositaron con los mismos parámetros sólo se varió el número de ciclos.

Tabla I	
Especificaciones técnicas de los crecimientos.	
Presión (Pa)	4×10^{-3}
Temperatura (°C)	400
Tiempo de exposición de las fuentes (s)	10
Tiempo de exposición de las purgas (s)	3
Comienza	ZnTe
Termina	CdTe

Las muestras fueron primeramente caracterizadas por DRX en la configuración $\theta-2\theta$, empleando un difractómetro de polvo Siemens D-5000. Para las mediciones se utilizó la radiación $K_{\alpha 1}$ emitida con un ánodo de Cu de $\lambda=1.54056 \text{ \AA}$. Los difractogramas obtenidos en ambos casos se muestran en la Figura 2, donde se han insertado además, a modo de comparación, los difractogramas correspondientes a dos muestras patrones de CdTe y ZnTe.

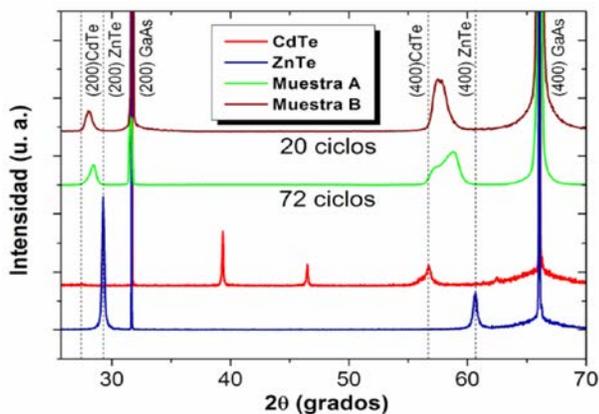


Figura 2. Difractogramas de las muestras A, B y de muestras patrones de CdTe y ZnTe. Las líneas de puntos corresponden a los ángulos de Bragg del ZnTe y CdTe en cada una de las direcciones cristalográficas apreciadas.

En dicha figura se puede observar la gran anchura y asimetría de los picos de intensidades en cada una de las direcciones cristalográficas, lo cual sugiere la obtención de compuestos ternarios $Cd_xZn_{1-x}Te$ con CG a lo largo de la línea de profundidad de las muestras.

Como parte de los objetivos de este trabajo pretendemos determinar el perfil de composición de las películas de $Cd_xZn_{1-x}Te$ ($0 \leq x \leq 1$) con CG usando la DRX. Para reproducir la difracción de un determinado plano cristalino simularemos la capa de CG como si estuviera compuesta por un conjunto finito de capas delgadas cada una con composición constante [7]. La distribución de intensidades del haz difractado en una dirección $[hkl]$ por una capa de $Cd_xZn_{1-x}Te$ con composición x arbitraria viene dada por una función Pseudo-Voigt:

$$I_{hkl}(\varphi) = y_o + I_{int} \left(\frac{2m_u w}{\pi (4(\varphi - 2\theta_{Bragg})^2 + w^2)} + \frac{1 - m_u}{\sqrt{\pi} w} \sqrt{4 \text{Log} 2} * e^{-\frac{(4 \text{Log} 2)(\varphi - 2\theta_{Bragg})^2}{w^2}} \right) \quad (\text{eq 1})$$

donde y_o es el origen de la intensidad (toma en cuenta que el difractograma puede tener una intensidad de fondo diferente de cero), I_{int} es la intensidad integrada de la reflexión, w es el ancho del pico a la mitad de la altura, m_u determina el peso de la distribución Lorentziana ($0 \leq m_u \leq 1$) y φ es la variable angular.

Así mismo, la expresión para la intensidad integrada de la reflexión, I_{int} , viene dada por la siguiente ecuación:

$$I_{int} = |F_{hkl}|^2 p \left(\frac{1 + (\cos 2\theta_{Bragg})^2}{(\sin \theta_{Bragg})^2 \cos \theta_{Bragg}} \right) * e^{-\frac{2\mu d}{\sin \theta_{Bragg}}} \quad (\text{eq 2})$$

En la expresión anterior se observa la dependencia de la intensidad integrada con el factor de estructura (F_{hkl}), el factor de multiplicidad (p), el factor de Lorentz (término entre paréntesis) y la absorción (término exponencial); en este último μ designa al coeficiente de absorción lineal de la capa, que fue tomado para los materiales empleados de [8].

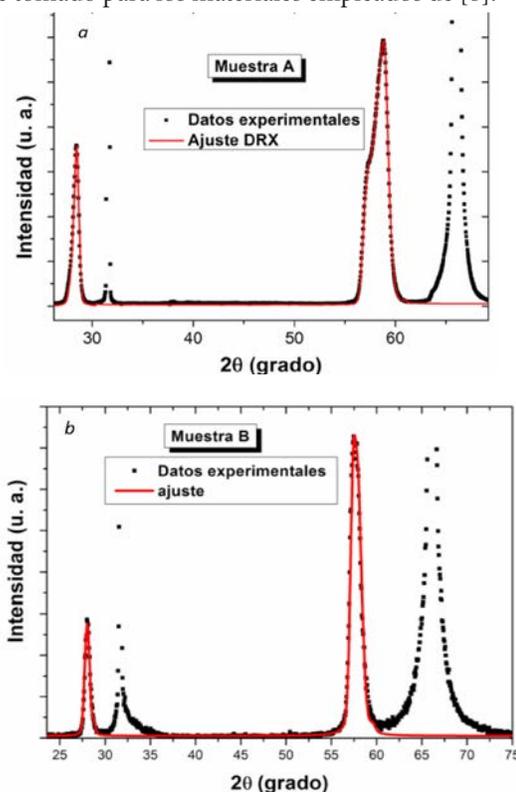


Figura 3. Difractogramas de las muestras a, b y de muestras patrones de CdTe y ZnTe. Las líneas de puntos corresponden a los ángulos de Bragg del ZnTe y CdTe en cada una de las direcciones cristalográficas apreciadas.

Sumando las contribuciones de cada capa, obtendremos finalmente una función que ajusta nuestros picos en los difractogramas. En la Figura 3 se exponen los ajustes a los

difractogramas obtenidos en cada muestra, A (Figura 3a) y B (Figura 3b). Los picos que no se ajustan corresponden a los planos (200) y (400) de GaAs, sustrato utilizado para depositar dichas muestras.

En la Figura 4 se muestran los perfiles de composición obtenidos de los ajustes de los difractogramas en cada muestra. Podemos observar en dicha figura que la muestra A presenta mayor espesor que la B (alrededor de 240 y 125 nm para las muestras A y B respectivamente), ya que esta última se creció con un número menor de ciclos.

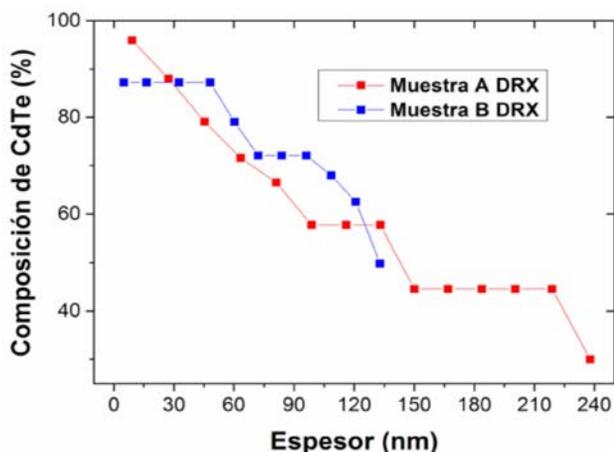


Figura 4. Perfiles de composición correspondientes a las muestras A y B.

Además se puede apreciar el importante papel que juega la interdifusión, obteniéndose perfiles de composición suavizados que evidencian la formación de compuestos ternarios de $Cd_xZn_{1-x}Te$ con CG; siendo esta más apreciable en la muestra A que por ser la más gruesa estuvo más tiempo a mayor temperatura y se logra una mejor difusión de los elementos dentro de la capa.

Con el objetivo de corroborar los resultados obtenidos en el ajuste de los difractogramas, se realizaron mediciones de SIMS a la muestra B, con lo cual se obtuvo un perfil de composición cualitativo, el cual se muestra en la Figura 5. En esta figura es posible apreciar la composición gradual de Zn y Cd: aumentando el Cd (y disminución de Zn) monótonamente hacia la superficie como es de esperar para esta muestra. Al mismo tiempo la composición de Te permanece constante correspondiendo a una aleación de $Cd_xZn_{1-x}Te$.

Después de analizar los resultados obtenidos en la caracterización de las muestras, podemos afirmar que se obtuvieron películas de $Cd_xZn_{1-x}Te$ con CG empleando una técnica sencilla y con bajos costos de implementación como la ICSS.

Las películas se obtuvieron depositando capas de CdTe y ZnTe sucesivamente de manera alternada, tal que el espesor de ambas capas (controlado por el número de ciclos) fue modificado a lo largo de las películas para producir un aumento (una disminución) de la concentración promedio de CdTe (ZnTe)

hacia la superficie.

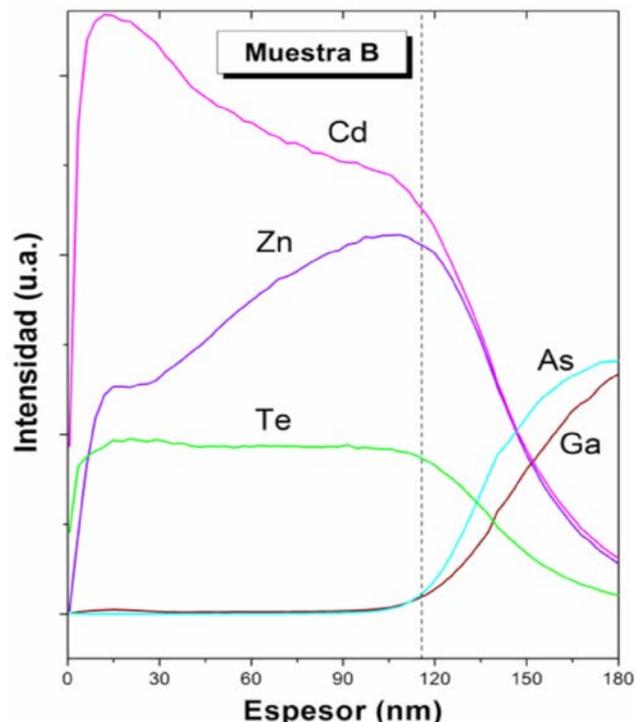


Figura 5. Perfiles de composición cualitativos de cada elemento a lo largo de la muestra B (SIMS).

El valor de la temperatura de crecimiento se seleccionó con la intención de lograr una buena interdifusión entre las capas. Los perfiles de composición de las muestras fueron a través del ajuste de los picos de intensidad de DRX. En ambas, la composición en la superficie está cerca del CdTe; mientras que en la interfaz con el sustrato, se muestra una composición intermedia debido a una fuerte interdifusión, ya que esta región estuvo más tiempo expuesta a la temperatura de crecimiento que el resto de la película.

Basados en los resultados obtenidos, sería interesante a través de la ICSS, incorporar capas de $Cd_xZn_{1-x}Te$ de variable "X" en celdas solares de CdS/CdTe.

[1] S. Callard, A. Gagnaire and J. Joseph, *J. Vac. Sci. Technol. A* 15 (4), 1997 2088.
 [2] D. C. Grillo, Y. Fan, J. Han, L. He, R. L. Gunshor, A. Salokatve, H. Hagerott, H. Jeon, A. V. Nurmikko, G. C. Hua and N. Otsuka, *Appl. Phys. Lett.* 63, 2723 (1993).
 [3] Tacke, M. *Appl. Phys. Lett.* 53, 23 2260 – 2262 (1988).
 [4] Ramesh Dhere, Tim Gessert, Jie Zhou, Joel Pankow, Sally Asher, Helio Moutinho, *Phys. Stat. Sol. (b)* 241, No. 3, 771–774 (2004) / DOI 10.1002/pssb.200304193.
 [5] Certificado de Autor de Invención; O. de Melo Pereira, E. M. Larramendi Cancio, Certificado No. 23135. Método y

aparato para el crecimiento de capas semiconductoras muy finas en régimen de epitaxia a capas atómicas (Abril 2006).

[6] O. de Melo, E. M. Larramendi, J. M. Martínez Duart, M. Hernández-Vélez, J. Stangl, H. Sitter, J. Crystal Growth 307 (2007) 253.

[7] A. Domínguez, “Estructuras de CdXZn1-XTe con composición variable”, Tesis de licenciatura, Universidad de La Habana, 2013, pp. 16-24.

[8] B. D. Cullity, Elements of x-ray diffraction.: Addison-Wesley Publishing Company, inc., 1956.

ESTUDIO COMPUTACIONAL DE LAS PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y VIBRACIONALES DE LAS ZEOLITAS CON TOPOLOGÍA MFI A ALTA PRESIÓN

COMPUTATIONAL STUDY ON STRUCTURAL AND VIBRATIONAL PROPERTIES OF ZEOLITES WITH MFI TOPOLOGY AT HIGH PRESSURE

C. TORRES^{a†}, E. NAVAS^a Y J. GULÍN-GONZÁLEZ^a

a) Grupo de Matemática y Física Computacional. Universidad de las Ciencias Informáticas (UCI), Carretera a San Antonio de los Baños, Km 2 ½, Torrens, Boyeros, La Habana, Cuba. CP. 19370; carlostp@uci.cu[†]

[†] autor para la correspondencia

Palabras clave: zeolitas, enrejado tipo MFI, Propiedades Estructurales y Vibracionales, Alta Presión.
Keywords: zeolites, MFI framework type, Structural and Vibrational properties, High Pressure.

PACS: 82.75.Vx, 81.40.Vw, 64.60.Nd, 63.50.Lm, 61.43.Bn

El comportamiento de los materiales nanoporosos a altas presiones ha sido motivo de estudios experimentales y teóricos [1]. Sus propiedades elásticas, las fases cristalinas y la amorfización inducida han sido investigadas por sus aplicaciones industriales [2, 3].

La zeolita ZSM-5, es el miembro más importante de la familia con enrejado de topología MFI, que se caracterizan por un alto porcentaje de silicio ($\text{Si}/\text{Al} > 5$). Sus aplicaciones más importantes están en la industria de procesamiento del petróleo.

La celda elemental está formada por 96 átomos T (Si, Al) y 192 de oxígenos [4]. La ZSM-5 presenta dos sistemas de canales: uno rectilíneo y otro sinusoidal (figura 1). A ambos se ingresa por aberturas formadas por anillos de 10 átomos T; los rectilíneos son paralelos a la dirección [010], y los sinusoidales a la dirección [100].

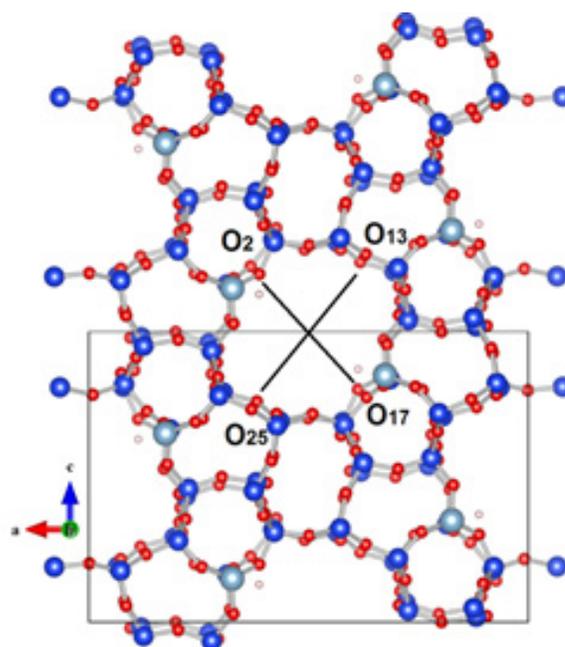
Previamente se estudió el comportamiento de la silicalita a alta presión [5]. Los resultados coincidieron con lo observado en la fase amorfa de baja densidad (LDA) [1, 2].

Esta investigación se propone dilucidar las características estructurales, vibracionales y elásticas de la ZSM-5 a alta presión via técnicas computacionales.

La estructura de la ZSM-5 utilizada se obtuvo de la Ref. [6]. Esta se corresponde con la variante todo-silicio, por tanto se procedió a la sustitución de 8 átomos de silicio por aluminio,

obteniendo una relación $\text{Si}/\text{Al}=11$ [12]. La sustitución se realizó en los sitios T2 [7]. La celda es ortorrómbica, con $a=20.0900 \text{ \AA}$, $b=19.7380 \text{ \AA}$, y $c=13.1420 \text{ \AA}$. Las presiones variaron de 0.0 a 7.0 GPa, con paso de 0.5.

Como criterio de convergencia se utilizó un valor de la norma del gradiente menor que $5 \times 10^{-3} \text{ eV/\AA}$. El radio de corte fue de 12.0 \AA . Las simulaciones se realizaron en una sola celda elemental.



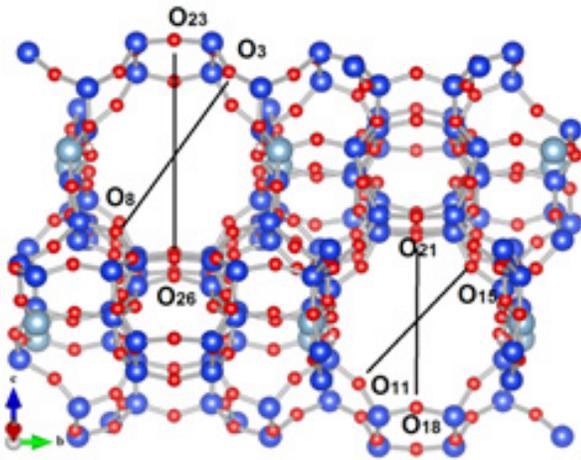


Figura 1. Celda de la ZSM-5, a 0 GPa, en la dirección [010] (superior), y en la [100] (inferior). Los nombres de los átomos son utilizados para calcular la elipticidad. (azul: silicio, rojo: oxígeno, gris: aluminio)

La Figura 2 muestra el comportamiento del volumen y los parámetros de la celda en el rango de presiones estudiado, observándose un decrecimiento como tendencia.

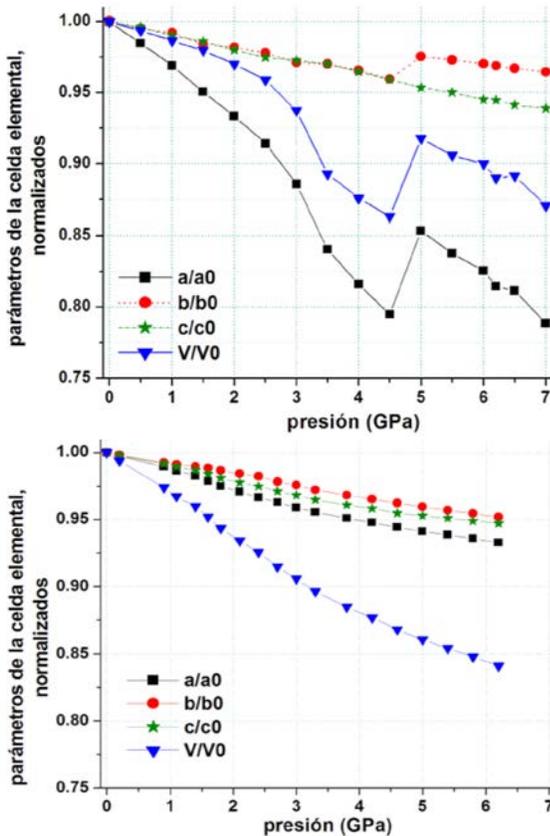


Figura 2. Parámetros de la celda de la ZSM-5 normalizados vs. presión. Este estudio (superior) y Ref. [12].

El volumen experimenta una disminución del 18.8% a la máxima presión y de 16.1% a la presión de 6.2 GPa que coincide con la experimental [12]. Se observa un aumento de volumen a 5.0 GPa. Este comportamiento difiere del observado previamente en la silicalita [5]. Resultados

similares se reportaron en estudios experimentales [1, 13, 14], vinculándose con la coexistencia de fases cristalinas y amorfas con diferentes densidades.

El aumento de volumen es resultado del incremento del parámetro a (figura 2). En la Ref. [12] el efecto no se observa pero estos resultados fueron obtenidos en muestras hidratadas; así que las moléculas de agua contribuyen a aminorar el efecto de la presión sobre la estructura. No obstante, para presiones por encima de 5.0 GPa los valores obtenidos para el norma del gradiente son cercanos al máximo aceptado (5×10^{-3} eV/Å), lo que significa que en estas condiciones los resultados hay que interpretarlos con cuidado y que el conjunto de potenciales propuesto no es igualmente efectivo para estos valores de presión.

El ángulo α se mantiene casi constante con el incremento de la presión, mientras que, como tendencia, β se incrementa hasta 90.17° y γ decrece aproximadamente en la misma proporción (89.86°), a la máxima presión aplicada.

Un parámetro importante, por su impacto en la difusión molecular es la elipticidad del canal [15], ver figura 3. Esta se define como la relación entre los diámetros mayor y menor del poro a la entrada del canal, constituido en este caso por el anillo de 10 miembros. Aquí se calculó mediante: $d(O_{13}-O_{25})/d(O_2-O_{17})$ para el canal recto (dirección [010]), y $d(O_{23}-O_{26})/d(O_3-O_8)$ para el sinusoidal superior izquierdo (SI) y $d(O_{18}-O_{21})/d(O_{11}-O_{15})$ para el inferior derecho (ID), en la dirección [100]. La notación es la mostrada en la figura 1.

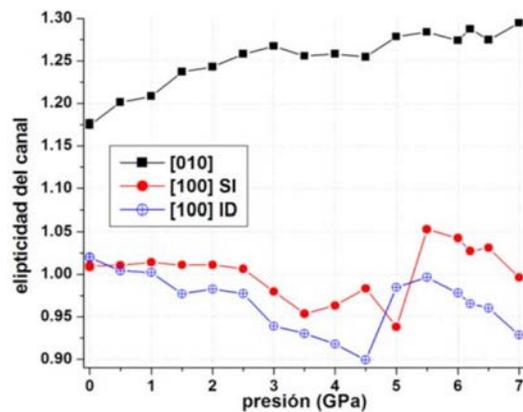


Figura 3. Elipticidad de los canales vs presión aplicada.

Obsérvese que el sinusoidal superior izquierdo, casi circular a 0 GPa se mantiene así hasta 2.5 GPa, luego tiene un comportamiento irregular invirtiendo las longitudes de los ejes de la elipse. El ID es elíptico hasta 4.5 GPa, siendo casi circular a 5.0 GPa y luego aumenta su elipticidad. El canal recto es elíptico en mayor medida que el sinusoidal. Finalmente, el cambio de elipticidad observado en los canales sinusoidales coincide con el aumento del parámetro a y del volumen a 5 GPa.

En cuanto a las propiedades elásticas, se ajustó la ecuación de estado de Birch-Murnaghan [16] y se obtuvo el módulo de

deformación volumétrica $K=(20.68\pm 1.59)$ GP, este valor está en correspondencia con lo reportado en estas zeolitas (Ref. [17], Tabla 1).

Zeolita	P (GPa)	$\Delta V(\%)$	Al/Si	No.H ₂ O	K
Mutinaite	6.0	13.2	7.6	60.0	n.r
ZSM-5 ^b	6.2	16.1	11.0	0	20.7
H-ZSM-5 ^c	6.2	16.6	11.4	36.0	23.7
Na-ZSM-5 ^d	6.2	18.5	18.3	28.4	18.2
Silicalite A ^a	6.0	21.2	∞	2.5	18.2
Silicalite B ^a	6.2	25.4	∞	3.0	14.2
Silicalite-1 ^e	6.0	21.5	∞	0	18.4
Silicalite-1 ^e	6.2	22.2	∞	0	17.3

a) Referencia [17], b) este trabajo, c) [12], d) [18], e) [5]. n.r: no reportado.

Experimentalmente se ha observado un incremento de este parámetro con el aumento del porcentaje de Al en el enrejado, tal y como se reporta en esta misma tabla.

La presencia del aluminio introduce importantes efectos en la estructura:

(i) Aparece un desbalance de carga eléctrica. Este desbalance se suple con la presencia de un protón que se enlaza a uno de los oxígenos del tetraedro en el que se encuentra el aluminio.

(ii) Se modifica el campo eléctrico local, las distancias de enlace T(Al, Si)-O, la rotación de los ángulos O-T-O, etc. a altas presiones.

En la tabla 1 aparecen resultados experimentales [12, 17, 18] y simulados [5], en zeolitas con topología MFI. El decrecimiento del volumen en las simulaciones es del orden de los reportados (alrededor del 20%). Este valor es menor que el obtenido en la silicalita.

Las variaciones del volumen y de la elipticidad muestran las grandes deformaciones de la estructura cristalina con la presión y el impacto que pueden tener en las propiedades.

Las bandas principales (figura 4) del espectro simulado reproducen correctamente los experimentos de espectroscopias Raman e infrarroja [2, 19, 21]. La banda correspondiente a 385 cm⁻¹ es asociada a las vibraciones de bending de los enlaces T-O-T en anillos de 5 miembros. La intensidad de esta banda disminuye con la presión y para P>3.0 GPa, se ensancha y desdobra en dos picos, con corrimiento hacia mayores números de onda. Este comportamiento, observado en Ref. [2] a partir de 1.5 GPa y A. Pasquarello [23], se asocia con la fase LDA. Un resultado similar se reportó en otras zeolitas [23, 24].

Los cambios en la banda de 385 cm⁻¹ demuestran la fuerte deformación que sufren los anillos de 5 miembros, una estructura secundaria crítica en la estabilidad del sistema de canales. Se enfatiza que estas deformaciones se observaron en

trabajos experimentales y se corresponden con la fase LDA [2].

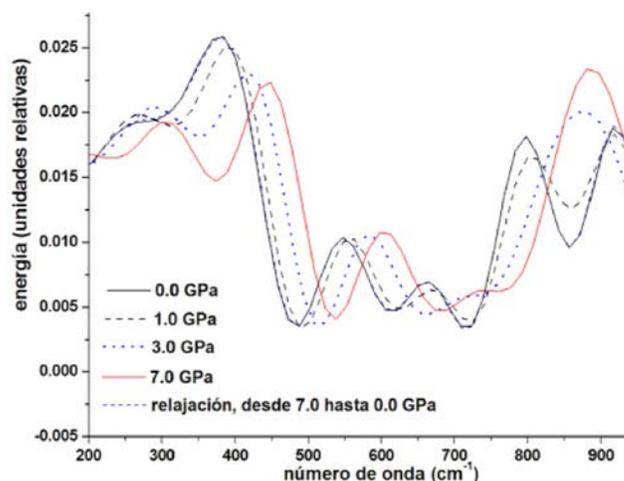


Figura 4. Espectros vibracionales simulados de la ZSM-5.

El espectro de la estructura relajada a 0 GPa recupera su forma original, lo que indica el carácter reversible del proceso [1, 22-23].

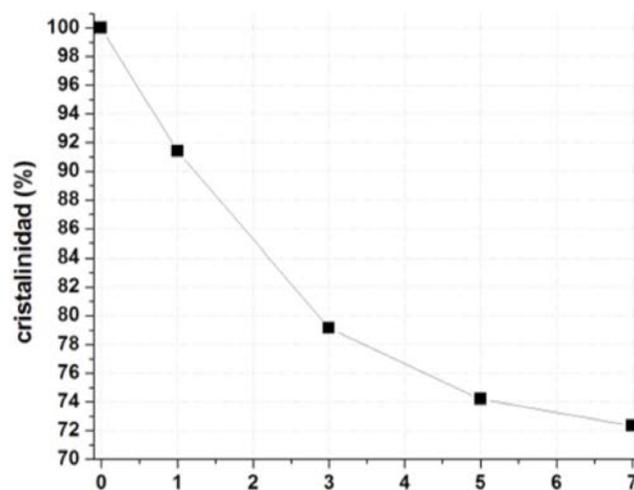


Figura 5. Porcentaje de Cristalinidad obtenido de las simulaciones.

A partir del comportamiento de las bandas del espectro y utilizando el criterio de S. Mintova et al. [25] se realizó un estimado del porcentaje de cristalinidad de las estructuras (figura 5). Este parámetro disminuye progresivamente con la presión hasta un 70% del valor inicial para 7.0 GPa, lo que también evidencia el grado de desorden del sistema a alta presión.

[1] G.N. Greaves, F. Meneau, et al, Nature Materials 2, 622 (2003).
 [2] Y. Fu, Y. Song, Y. Huang, J Phys Chem C 116, 2080(2012).
 [3] A. Sartbaeva, J. Haines, et al, Phys Rev B 85, 064109 (2012).
 [4] S. M. Auerbach, et al, Handbook of zeolite science and technology. Ed. Marcel Dekker, Inc. ISBN: 0-8247-4020-3. New York. (2003).
 [5] C. Torres et al, Struct Chem, 24, 909 (2013).

- [6] Ch. Baerlocher, L.B. McCusker, Database of Zeolite Structures. (2014) (<http://izasc.ethz.ch/fmi/xsl/IZA-SC/cif/MFI.cif>).
- [7] R. Grau, A.G. Peralta, et al, J. Phys. Chem. 2, 5716 (2000).
- [8] J. D. Gale, J Chem Soc, Faraday Trans, 93(4), 629 (1997).
- [9] J. Gulín-González, J. de la Cruz Alcaz, et al. Journal of Materials Chemistry, 10, 2597 (2000).
- [10] R. A. Jackson, C.R.A. Catlow, Molecular Simulation 1, 207 (1988).
- [11] G. Sastre, D.W. Lewis, C.R.A. Catlow, J Phys Chem 100, 6722 (1992).
- [12] S. Quartieri, et al, Journal of Solid State Chemistry, 184, 1505 (2011).
- [13] A. Isambert, et al, J. Mater. Chem. 18, 5746 (2008).
- [14] J. Haines, O. Cambon, et al, J. Am. Chem. Soc. 132, 8860 (2010).
- [15] H. van Koningsveld, J.C. Jansen, Micropor. Mesopor. Mater. 6, 159 (1996).
- [16] F. Birch, Phys. Rev. 71, 809 (1947).
- [17] S. Quartieri, R. Arletti, et al, Journal of Solid State Chemistry 191, 201 (2012).
- [18] R. Arletti, et al, Microporous Mesoporous Mater. 142, 696 (2011).
- [19] A. Miecznikowski, J. Hanuza, Zeolites 7, 249 (1987).
- [20] P.K. Dutta, M. Puri, J. Phys. Chem. 91, 4329 (1987).
- [21] M.M. Mohamed Mokhtar, et al. Ceramics International 39, 683(2013).
- [22] A. Pasquarello, R. Car, Phys. Rev. Lett. 80, 5145 (1998).
- [23] J. Gulín-González, GB. Suffritti, Micropor. Mesopor. Mater. 69, 127 (2004).
- [24] J. Gulín-González, P. Demontis, E. Navas-Conyedo, GB. Suffritti, J. Phys. Chem. Solids 73, 797 (2012).
- [25] S. Mintova, et al, J. Chem. Soc., Chem. Commun. 15, 1791 (1994).

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE NANOPARTÍCULAS DE MAGNETITA PARA LA REMOCIÓN DE Cu^{2+} DE AGUAS RESIDUALES.

SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF MAGNETITE NANOPARTICLES FOR REMOVING Cu^{2+} FROM WASTEWATER.

E. CRUZ^a, R. MARTÍNEZ^{a†}, J. JIMENEZ^a, S. DÍAZ^{a,b} Y F. CALDERÓN^{a,c}

a) Instituto de Ciencia y Tecnología de los Materiales, Universidad de La Habana, Cuba. erlen@imre.oc.uh.cu, ricardo@imre.oc.uh.cu[†]

b) Facultad de Física, Universidad de La Habana

c) CINVESTAV-Unidad Querétaro, IPN, Libramiento Norponiente No. 2000, Fracc.

Real de Juriquilla, Querétaro, Querétaro, México

† autor para la correspondencia.

Palabras clave. 81.16.Be Chemical synthesis methods, 81.07.Bc Nanocrystalline materials, 75.75.Cd Fabrication of magnetic nanostructures.

La magnetita (Fe_3O_4) es uno de los óxidos de hierro más comunes e importantes [1]. Entre sus cualidades se encuentra la de remover iones metálicos disueltos en agua (Hg^{2+} , Cd^{2+} , Cr^{4+} , Cu^{2+} y Pb^{2+} [2]) y materiales orgánicos y biológicos [3].

Entre las ventajas del empleo del Fe_3O_4 para la extracción de iones de metales pesados se encuentra su bajo costo, [4]; la posibilidad de tratar grandes volúmenes de agua [5] y separar fácilmente la fase estacionaria (Fe_3O_4) aplicando un campo magnético externo. Además, el Fe_3O_4 se puede obtener como nanopartículas, con una alta superficie de contacto que favorece la captura de contaminantes [6]. Entre los de mayor interés se encuentran los metales pesados, por sus efectos nocivos a la salud humana y al medio ambiente [7] (un exceso de Cu^{2+} en el organismo puede provocar la muerte [8]).

Las nanopartículas de Fe_3O_4 empleadas se sintetizaron mediante la técnica de coprecipitación controlada de sales [9] adicionando la mezcla de las disoluciones acuosas de FeCl_2 , 1 mol/L y FeCl_3 , 2 mol/L a otra de NaOH 1.5 mol/L a temperatura ambiente y en atmósfera de nitrógeno. Se realizaron tres síntesis en igualdad de condiciones que produjeron las muestras de magnetita 1, 2 y 3.

Los difractogramas de las muestras fueron similares (intensidad y posición de los picos). La figura 1 presenta el patrón de difracción de la muestra 1.

El análisis de fases de los difractogramas revela que todas las muestras son cristalinas y presentan una estructura cúbica de espinela inversa de Fe_3O_4 o maghemita ($\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$). No hay hematita ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$) ya que no se observan los picos más

intensos correspondientes a esta fase: $2\theta = 38.814$, 63.913 y 58.299 con (hkl) (104), (116) y (024) respectivamente [10]. La presencia o ausencia de $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ no se puede asegurar mediante DRX, debido a la similitud de las reflexiones de la maghemita y la magnetita [11, 12], pero los espectros de FTIR de las muestras si indican la ausencia de maghemita.

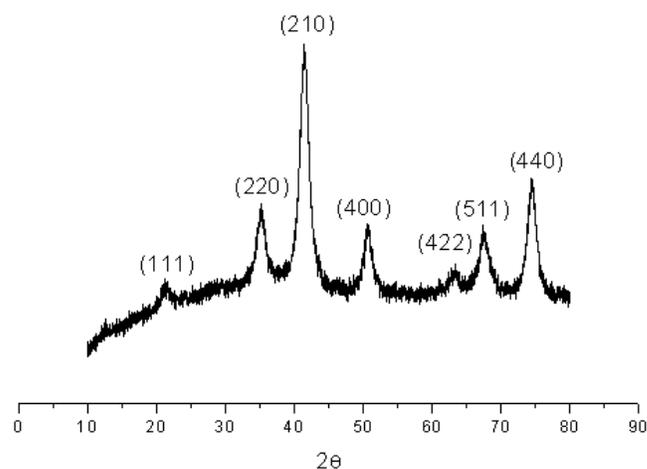


Figura 1: Patrón de difracción de la muestra 1 (radiación de Co, voltaje de aceleración de 30 kV, corriente de emisión de 20 mA y paso de medición de 0.02°).

El tamaño de cristalita se determinó mediante la ecuación de Scherrer. Los valores fueron similares: 8,7; 7,7 y 7,6 nm. El tamaño nanométrico de las muestras se evidencia en los ciclos de histéresis obtenidos por magnetometría vibracional ($H_{\text{max}} = 16$ kOe) a temperatura ambiente. Todas las muestras exhibieron el comportamiento superparamagnético clásico:

altos valores de magnetización de saturación (M_s) y campo coercitivo (H_c) cercano a cero (tabla I).

Muestra	M_s (emu/g)	M_s corregida (emu/g)	H_c (Oe)
1	36.23	42.42	20
2	47.25	51.75	12
3	57.00	61.89	10

La diferencia entre el valor de M_s para cada muestra y el del Fe_3O_4 masivo (90 emu/g) [13] puede deberse al tamaño nanométrico de las partículas, la oxidación durante la síntesis y la humedad de las muestras. Lo primero se evidencia por las curvas de histéresis y el tamaño de cristalita. La humedad de la muestra se confirma en el FTIR (banda ancha en 3346 cm^{-1} y en 1614 cm^{-1} atribuidas a las vibraciones de las moléculas de agua libre o adsorbida) y en los termogramas, realizados en atmósfera de nitrógeno hasta $700\text{ }^\circ\text{C}$ donde se observa una pérdida de masa del 14% para la muestra 1; 8.14% para la muestra 2 y 7.74% para la muestra 3. Estas pérdidas de masa solo pueden atribuirse a la desorción del agua adsorbida en la superficie de las partículas ya que el Fe_3O_4 no posee agua de hidratación en su estructura ni grupos hidroxilo como otros óxidos de hierro [14]. El valor de M_s corregido, descontando la humedad, se muestra en la tabla I. Los valores de H_c están en correspondencia con los tamaños de cristalita.

La adsorción de los iones Cu^{2+} por las muestras de Fe_3O_4 se estudió a diferentes pH y tiempos de contacto. Las disoluciones de Cu^{2+} se prepararon por dilución con agua bidestilada de un patrón de $Cu(NO_3)_2$ de 1000 mg/L (firma UNI-CHEM). Todas las determinaciones del contenido de Cu^{2+} se realizaron en un espectrómetro de absorción atómica.

El pH al que ocurre la adsorción máxima de Cu^{2+} se determinó comparando los cambios de la $[Cu^{2+}]$ con el pH para las disoluciones que contenían 0.01 g de diferentes muestras de Fe_3O_4 (M1, M2 y M3) y una disolución patrón (P). La $[Cu^{2+}]$ en todas las disoluciones fue de 5 mg/L y se tomaron seis alícuotas de 20 mL cada una con valores de pH de 2, 4, 6, 7, 8 y 9. Las disoluciones se agitaron (120 rpm) en una zaranda durante 24 horas a 300°C . Todos los procedimientos se realizaron por triplicado.

La cantidad de Cu^{2+} en todas las disoluciones disminuye con el aumento del pH (figura 3). En la disolución P ocurre a $pH > 6$; mientras que, en las disoluciones con M1, M2 y M3 se produce a $pH > 2$.

El comportamiento de la disolución P se debe a la formación de $Cu(OH)_2$, que es insoluble en agua ($K_{ps} = 2.00 \times 10^{-15}$ a 25°C [15]) y comienza a formarse a $pH > 6$; aunque en dependencia de la $[Cu^{2+}]$ puede precipitar a valores de $pH < 6$.

La disminución de la $[Cu^{2+}]$ en las disoluciones con M1, M2 y M3 es más marcada que en la P, lo que demuestra la adsorción

de Cu^{2+} en el Fe_3O_4 . Esto se observa claramente a pH entre 2 y 6 donde la $[Cu^{2+}]$ en la disolución P es prácticamente constante. A $pH > 6$ la diferencia disminuye al producirse en las disoluciones M la precipitación del $Cu(OH)_2$. La cantidad de Cu^{2+} absorbida por el Fe_3O_4 a esos pH se obtiene restando al valor de la $[Cu^{2+}]$ obtenido en la disolución P el de las disoluciones M a cada pH. Así se obtiene, que el pH de adsorción máxima para M1=6 para M2=M3=7.

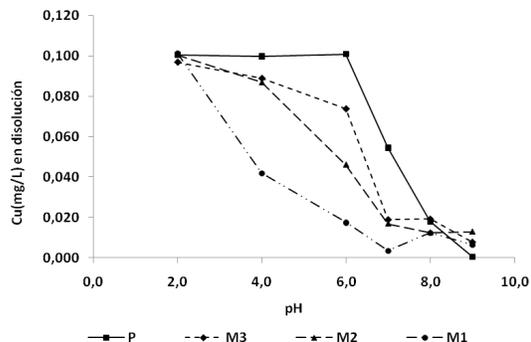


Figura 2: Efecto del pH en la adsorción de Cu^{2+} en las muestras de magnetita.

Para la determinación del tiempo de adsorción máxima se preparó una disolución con $[Cu^{2+}] = 10\text{ mg/L}$ y $pH\ 7$, ajustado con $NaHPO_4$. (Aunque para M1 la adsorción máxima ocurre a pH 6 se tomó pH 7 para poder comparar los resultados). La disolución se filtró para separar el $Cu(OH)_2$ precipitado. Se tomaron 200 ml del filtrado, se sustrajeron 4 ml para blanco y a los 196 ml restantes se le adicionaron 0.02 g de Fe_3O_4 . El tiempo total de trabajo fue de 11 h. Las condiciones experimentales fueron iguales a las del ensayo anterior.

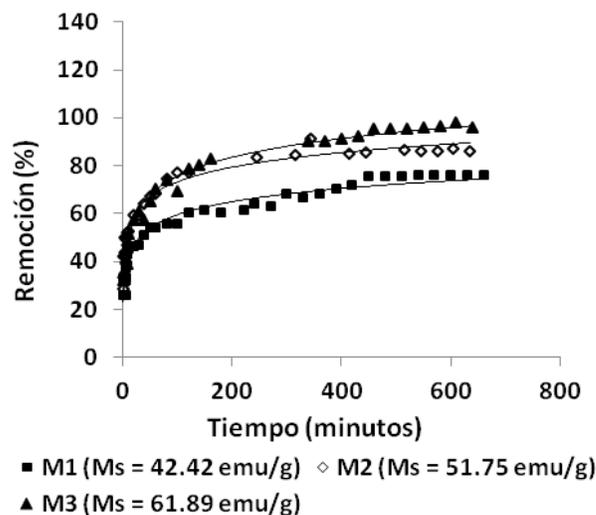


Figura 3: Efecto del tiempo de equilibrio en la adsorción de Cu^{2+} por las muestras de magnetita con diferentes M_s .

La variación de la adsorción máxima de Cu^{2+} con el tiempo de equilibrio para las 3 muestras de Fe_3O_4 (figura 3) tiende a un valor constante. Otros autores reportan un comportamiento similar [16].

Los tiempos mínimos correspondientes a la adsorción máxima (obtenidos de las curvas de la figura 3) fueron: 300 min para

M1 con una remoción (R) = 68%; 245 min para M2 con R = 83% y 340 min para M3 con R = 90 %. De modo que, a las 6 h (360 min) de tiempo de contacto todas las muestras alcanzan el equilibrio de adsorción.

La figura 3 sugiere que la remoción se incrementa con Ms del adsorbente, es decir, la Ms del Fe_3O_4 influye en la remoción del Cu^{2+} .

[1] Q. Jihui, Journal of Environmental Sciences 20, 1-13 (2008)

[2] H. Katsumata y col., Journal of Environmental Management 69,187-191(2003)

[3] G. B.Cotten, J. D. Navratil y H. B. Eldredge, Proceedings of Waste Management 1999 (1999).

LA EMISION MAGNETICA BARKHAUSEN EN EL ACERO AISI 1045 DEFORMADO PLASTICAMENTE CON RODILLO

THE MAGNETIC EMISSION BARKHAUSEN IN THE STEEL AISI 1045 DEFORMED PLASTICALLY WITH ROLLER

G. MORENO^{a†}, J. CAPO-SÁNCHEZ^b, T. FERNANDEZ^b, D. AYARDE^b

a) Facultad de Física, Instituto Superior Minero Metalúrgico de Moa, Cuba; gmoreno@ismm.edu.cu†

b) Facultad de Física, Universidad de Oriente, Cuba.

† autor para correspondencia

Palabras claves: Barkhausen effect, 75.60.Ej; crystal microstructure, 61.72.-y

Cuando los materiales ferromagnéticos se someten a campos magnéticos variables, la variación en la inducción magnética se presenta de forma discontinua como una respuesta al movimiento de las paredes de dominios magnéticos. Estos saltos abruptos se conocen como Ruido Magnético de Barkhausen (RMB).

El RMB es sensible a los parámetros empleados para la magnetización, como la frecuencia [1] y la intensidad de magnetización [2]. Depende también de las características del material, como el tamaño de grano [3], el contenido de carbono [4], la microestructura y los esfuerzos mecánicos aplicados.

Los efectos de las tensiones elasto-plásticas pueden ser detectados por mediciones magnéticas, ya que las propiedades magnéticas y mecánicas están influenciadas por la microestructura del material ferromagnético [5, 6].

Estudios realizados en aceros de medio contenido de carbono demuestran, que a medida que disminuye la dureza, el parámetro RMB_{rms} aumenta a medida que la densidad de defectos microestructurales disminuyen [7].

Comparaciones entre mediciones de RMB y dureza producidas por deformaciones plásticas, han verificado la pertinencia de la técnica para evaluar cambios microestructurales producidos por trabajo de deformación en frío [8].

Analizando los diferentes estudios que sobre la utilización de esta técnica se han realizado para evaluar los estados de dureza producidos por diferentes efectos, se ve la posibilidad de aplicar la técnica de RMB a muestras de acero AISI 1045 deformadas en frío.

Por tal motivo el presente trabajo tiene como objetivo analizar mediciones de RMB en muestras deformadas en frío y su correlación con la capacidad de endurecimiento de este acero. Las muestras fueron obtenidas del AISI 1045 con composición química mostrada en la tabla 1 [9].

C	Mn	P	S	Si
0,45	0,65	≤ 0,040	≤ 0,050	0,35

La deformación plástica en frío es un método de endurecimiento de materiales que logra alta dureza. La deformación plástica superficial por laminación, llamado acabado sin viruta, es un trabajo en frío en la superficie del material donde se aplica una fuerza que excede el límite de resistencia a la deformación de la aleación. Para ello se aplicaron cargas de 500, 1500 y 2500 N, en correspondencia con la dureza a obtener.

La tabla 2 muestra los valores de los parámetros de deformación utilizados: Nr (número de revoluciones), P (fuerza) y S (avance de la herramienta).

Muestras	Factores		
	Nr (rev/min)	P (N)	S (mm/rev)
1	27	500	0,075
2	27	500	0,125
3	27	500	0,25
4	54	1500	0,075
5	54	1500	0,125
6	54	1500	0,25
7	110	2500	0,075
8	110	2500	0,125
9	110	2500	0,25

La instalación experimental utilizada, se muestra esquemáticamente en la Figura 1.

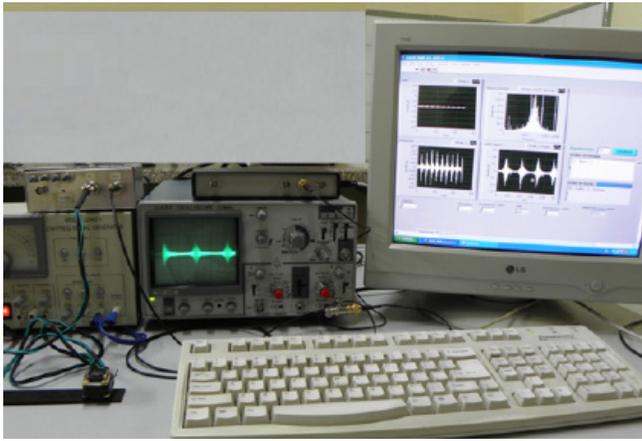


Figura 1. Instalación para la medición del RMB.

Está básicamente constituida por un circuito magnetizador capaz de suministrar una onda sinusoidal de 10 Hz a un amplificador de potencia que alimenta la sonda magnetizadora con un campo magnético de $1,4 \times 10^4$ A/m, suficiente para alcanzar la saturación del material.

La señal del sensor de RMB es amplificada y filtrada por un filtro pasabanda de 1 kHz hasta 200 kHz. Las señales son visualizadas en un osciloscopio digital y una tarjeta National Instrument NI USB-6212xO adquiere los datos a una frecuencia de muestreo de 400 kHz. A través de un software de medición desarrollado por los usuarios en LabView se controla y almacenan los datos en una PC.

Como parámetro característico del ruido magnético de Barkhausen se usó la raíz cuadrada media (RMB_{rms}) [10] de la señal dado por la expresión (1). El valor utilizado se corresponde al promedio de 20 mediciones de la señal RMB obtenidos sobre cada muestra.

$$RMB_{rms} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (V_i)^2}{n}} \quad (1)$$

donde V_i es el máximo de cada salto de la señal y n es la cantidad de saltos de RMB.

El comportamiento de la tensión inicial se determinó con el empleo del método de la cicloide, se consideraron los parámetros que dependen de las características mecánicas del material, tensión para una deformación unitaria A y m , el cual puede ser calculado como se muestra en [11].

Los resultados de los mismos fueron; $A = 524,03$ MPa (para fuerzas de 500; 1500 y 2500 N) y $m = 0,072$ mm, para fuerzas de 500 y 1500 N y $m = 0,009$ mm, para fuerza de 2500 N.

Se tuvo en cuenta la tensión límite de fluencia y una tensión elástica de 200 MPa (norma ASTM). En la figura 2 se muestra el comportamiento de la tensión inicial (σ_i) respecto a las fuerzas aplicadas en el proceso de laminación.

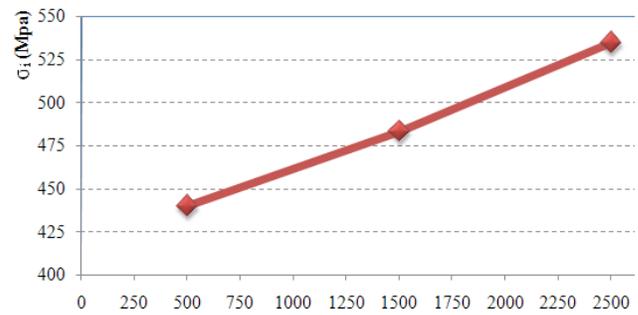


Figura 2. Comportamiento de la σ_i por cicloide en la deformación del acero AISI 1045.

Como se puede observar de esta figura, el incremento de la fuerza tiene dos efectos fundamentales sobre la muestra:

-Cuando el valor de la fuerza aplicada sobrepasa el límite de fluencia de la muestra, ocurren transformaciones microestructurales, inherentes a la tensión, lo que provoca un aumento en el grado de deformación del material.

-Al aumentar el grado de deformación del material, es necesario aplicar más tensiones para continuar deformando, debido a la vinculación directa de la deformación con el fenómeno de endurecimiento.

La figura 3 muestra el comportamiento característico del RMB para nueve muestras sometidas a fuerzas de 500, 1500 y 2500 N.

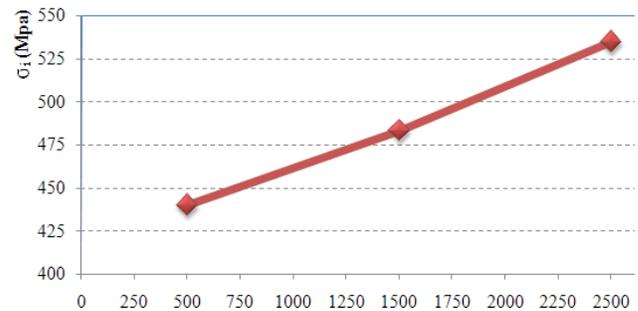


Figura 3. Variación de la señal de RMB con el aumento de la fuerza.

Se puede observar que en las muestras deformadas, la señal del Barkhausen disminuye con el aumento de la fuerza desde 0,418 V hasta 0,41 V. Esto puede ser explicado de la siguiente manera

-A medida que aumenta la presión superficial aplicada a la muestra, aparecen un mayor número de sitios de anclaje, los cuales actúan como barreras al movimiento de los dominios magnéticos, como una consecuencia directa, disminuye la señal del RMB, por esta razón las muestras (7-8-9) presentan los menores valores de RMB.

La figura 4 muestra un comportamiento similar para las nueve muestras al aumentar el valor de (S) . Es decir, a medida que aumenta la penetración de la herramienta en el material, se

observa que la emisión magnética de Barkhausen disminuye desde valores de 0,418 V a 0,408 V, al aumentar el parámetro (S) desde valores de 0,075 mm/rev a 0,25 mm/rev.

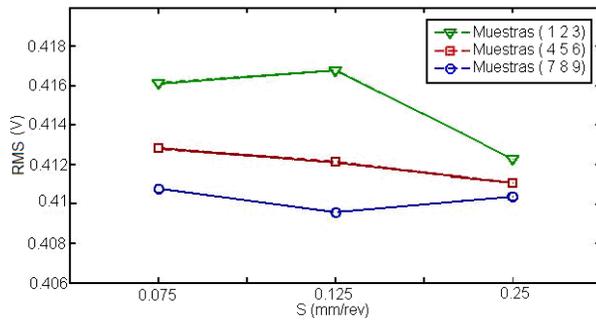


Figura 4. Variación de la señal de RMB con el aumento del avance de la herramienta.

En la medida que aumentan los valores de la fuerza y el avance de la herramienta, crecen las tensiones superficiales aplicadas al material y disminuye la señal del RMB.

El valor del RMB disminuye poco entre los puntos (7-8-9), este comportamiento podría ser un resultado de que la muestra está alcanzando la saturación, lo que estaría en correspondencia con el aumento en el grado de dureza.

El incremento de la dureza en estas muestras se debe a la reducción del tamaño de grano producido por la acción de las cargas por rodadura, el resultado se corresponde con la hipótesis de que al incrementar las tensiones de compresión disminuye el efecto del tamaño de las cristalitas.

CONCLUSIONES

En este trabajo se ha establecido una correlación entre el ruido magnético de Barkhausen a través del parámetro RMBrms con las variables tecnológicas empleadas en el proceso de conformación del acero AISI 1045. También se ha demostrado que en las muestras de este material, a medida que aumenta la deformación, aumenta la capacidad de endurecimiento del material.

Los resultados obtenidos muestran la viabilidad de utilizar la técnica de ensayos no destructivos del ruido magnético de Barkhausen, para identificar los diferentes niveles de dureza correspondientes a materiales ferromagnéticos deformados superficialmente en frío.

- [1] D.C Jiles, Zechoslovak Journal of Physics. 50 893-988 (2000).
- [2] A. Dhar and. D.L. Atherton, IEEE Transactions on Magnetics. 28 3.363-3.366 (1992).
- [3] R. Ranjan, D. Jiles, P.K. Rastogi, IEEE transactions on magnetics. 23 1.869-1.879 (1987).
- [4] J. Kameda, R Ranjan, Acta Metallurgical. 35 1.515-1.526 (1987).
- [5] D. J. Buttle, C. B. Scruby, G. A. D. Briggs and J. P. Jakubovics, Proc. R. Soc. Lond. A. 414 469-497 (1987).
- [6] G. Bertotti, Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 320 2436-2442 (2008).
- [7] F.A. Franco y L.R. Padovese, Scientia et Technica Año XIII. No 36 (2007).
- [8] István Mészáros, Materials Science Forum. 473-474 231-236 (2005).
- [9] Key to Steel, 'Influence of Alloying Elements on Steel Microstructures', Key to Steel Web Site.2002. Disponible en la World Wide Web en <http://www.key-to-steel.com/>.
- [10] T. W. Krause, L. Clapham and D. L. Atherton, Journal of Applied Physics 75 7983-7988 (1994).
- [11] T. Fernández, "Mecanismos de endurecimiento del acero AISI 1045 deformado por rodadura". Tesis de doctorado, Instituto Superior Minero Metalúrgico de Moa, 2011.

TRANSICIONES DE FASES Y DEL GAP DIRECTO-INDIRECTO INDUCIDAS POR PRESIÓN EN MGO: ESTUDIO MEDIANTE DFT

TRANSITION OF PHASES AND THE DIRECT-INDIRECT GAP INDUCED UNDER PRESSURE IN MGO: A STUDY USING DFT

G. P. PATRICIA ABDEL-RAHIM^{a†}, J. ARBEY-RODRÍGUEZ^b Y M. G. MORENO-ARMENTA^c

a) Facultad de Ingeniería, Doctorado en Ing-Ciencia y Tecnología de Materiales, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá. ggabdelr@unal.edu.co †

b) Departamento de Física, Grupo GEMA, Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá; jarodriguez@unal.edu.co

c) Centro de Nanociencias y Nanotecnología CNyN, UNAM, Ensenada, BC, México; moreno@cnyn.unam.mx

† correspondign author.

Palabras claves: phase transition, pressure, indirect gap, direct gap

Varios estudios teóricos y experimentales han encontrado que la estructura de cristalización más estable para MgO es en la fase NaCl [1,2]. Experimentalmente, se encontró que la estructura NaCl es estable para valores de presión hasta de 227 GPa [3]. Por otro lado, varios estudios mecánico cuánticos predicen que la presión de transición NaCl-CsCl a $T = 0\text{K}$ y en un rango de presiones muy amplio que va desde unos 205 GPa [4] hasta 1050 GPa [5].

Usamos el código WIEN2k, el cual utiliza el método Full Potential – Linearized Augmented Plane Waves [6]. En el cálculo del potencial de correlación e intercambio se utilizó la aproximación del gradiente generalizado (GGA por sus siglas en inglés) en la versión de Perdew, Burke y Ernzerhof [7] dentro del formalismo que provee la teoría de la densidad funcional. En los cálculos llevados a cabo en este trabajo se utilizaron los siguientes parámetros: $R_{\text{Mg}} = 1.45$ u.a.; $R_{\text{O}} = 1.45$ u.a.; $R_{\text{MT}} \cdot K_{\text{max}} = 8.0$; $l_{\text{max}} = 10$ y $G_{\text{max}} = 14$.

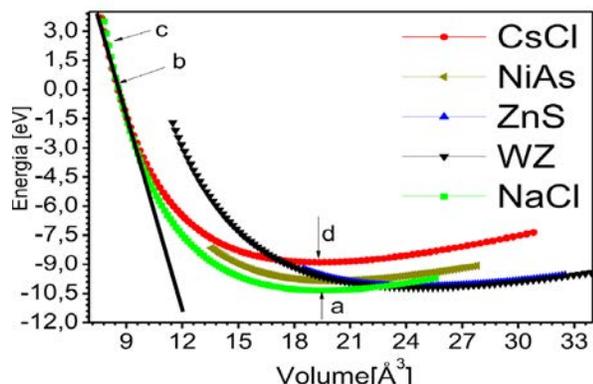


Figura 1. Energía vs volumen para el MgO.

La Figura 1 muestra la dependencia de energía total con el volumen, para las cinco estructuras. Las energías y volúmenes están dados por fórmula unidad de MgO, hay dos en las celdas wurtzita y NiAs y una en los otros casos.

En la Figura 1, se observa que cada estructura considerada es metaestable ya que existe un mínimo en la curva correspondiente. La fase más estable es la NaCl ya que posee el valor del mínimo de energía más bajo de las curvas examinadas. Además existe un mínimo local en la estructura wurtzita con energía total 0.16 eV/formula unidad mayor que el mínimo para la estructura NaCl. La existencia de una fase wurtzita meta-estable es importante en la fabricación de compuestos ternarios.

La curva correspondiente a la estructura NaCl se cruza con la curva de la estructura CsCl. Cerca del punto de cruce las pendientes de las curvas son las mismas, tal como se resalta mediante una línea tangente a las curvas de las fases NaCl y CsCl. Por consiguiente, en dicho punto (o cerca de él) las entalpías son iguales y por tanto, es posible cambiar de la fase NaCl a la fase CsCl con una presión de transición externa de $P_T = 600$ GPa. Este valor de la presión esta en razonable acuerdo con los datos teóricos obtenidos por otros autores [12]. En la transición hay una reducción de volumen del 4% desde $\sim 8.3 \text{ \AA}^3$ a $\sim 7.9 \text{ \AA}^3$.

Los puntos señalados en la Figura 1, corresponden a:

- a) Fase NaCl en el mínimo de energía, $P = 0$;
- b) Fase NaCl antes de la transición de fase a CsCl $P < P_T$;

c) Fase CsCl después de la transición de fase desde NaCl $P > P_T$.

d) Fase CsCl en condiciones de mínima energía, $P = 0$.

Los parámetros estructurales calculados para el MgO, en sus puntos de mínima energía (a) y (d) se reportan en la Tabla I y las reportadas por otros autores en la Tabla II. Donde el parámetro de red (a_{\min}) en la fase NaCl y su valor experimental no supera el 1.4% del valor teórico obtenido por nuestros cálculos. Mientras para el módulo de volumen (B_0) es solo 0.6%. Para la fase CsCl existen reportes teóricos y para las fases WZ, ZnS y NiAs no existen reportes ni teóricos ni experimentales.

Tabla I: Calculo de los PE del MgO calculadas por este trabajo.					
	NaCl	CsCl	WZ	ZnS	NiAs
a_{\min} [Å]	4.273	2.685	3.307	4.617	2.964
c/a	-	-	1.578	-	1.770
B_0 [GPa]	155	136	112.9	110.3	134.1
E [eV]	-10.35	-8.89	-10.19	-10.12	-9.84
E_g [eV]	4.4	2.3	4.2	3.4	2.8

Tabla II: Calculo de los PE del MgO calculadas por este trabajo.			
	Teórico NaCl	Experimental NaCl	Teórico CsCl
a_{\min} [Å]	4.165 ^a , 4.192 ^b	4.213 ^c	2.604 ^a , 2.586 ^b 2.604 ^a , 2.586 ^b
B [GPa]	171	156 ^d	163
B'	4.92 ^a , 4.658 ^b		3.396 ^a 2.891 ^b

^aReferencia [2], ^bReferencia [6], ^cReferencia [8], ^dReferencia [9]

En la Figura 2 muestra la dependencia de la energía del gap con la presión para MgO en la fase NaCl. Y la presión a la cual el material cambia de gap directo a indirecto es de 138 GPa. Además determinar la dependencia del parámetro de red con la energía del gap.

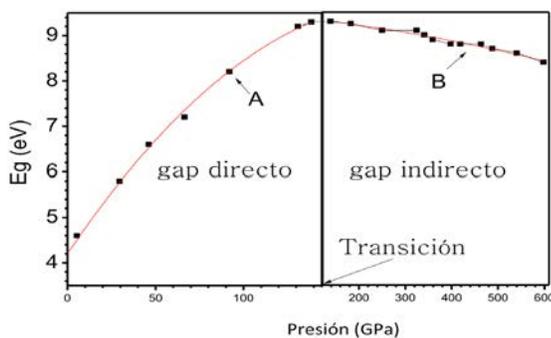


Figura 2. E_g vs. P , en la fase NaCl (antes de la transición a CsCl) mostrando que el gap cambia de gap directo a gap indirecto, a la P de ~138 GPa.

La Figura 3 muestra dependencia del gap con la presión para la fase CsCl después de la presión de transición de fase NaCl.

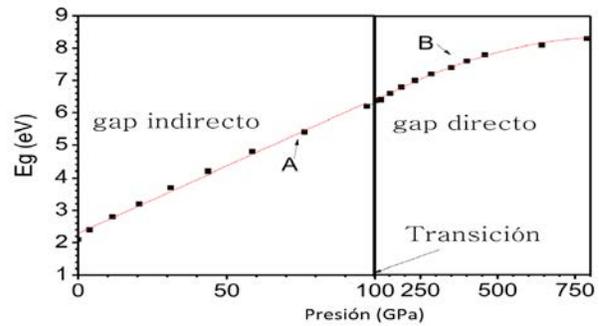


Figura 3: E_g vs. P , en la fase CsCl (después de la transición de fase NaCl) mostrando que el gap cambia de gap indirecto a directo, a la P de ~100 GPa.

Se observa que al incrementar la presión se incrementa la energía del gap, en forma casi lineal para valores de presión menores a 100 GPa. Para valores mayores a 100 GPa la E_g continúa incrementándose.

Determinamos que en la fase NaCl a $P = 0$ GPa el gap es directo de ~4.4 eV y antes de la presión de transición en la fase NaCl el gap es indirecto de ~8.4 eV y en la fase CsCl a $P = 0$ GPa el gap es indirecto de ~2 eV y después de la presión de transición en la fase CsCl el gap es directo. Se halló que a $P \sim 138$ GPa el gap cambio de directo a indirecto para NaCl y el gap cambia de indirecto a directo a $P \sim 100$ GPa para CsCl.

En la construcción de dispositivos optoelectrónicas la absorción o emisión de fotones, es más eficiente para materiales con gap directo. Se determinó que para el MgO a presiones $P < 138$ GPa y $P > 100$ GPa, en las fases NaCl y CsCl, respectivamente el MgO cambia sus propiedades electrónicas a gap directo.

[1] V. R. Chaudhary, A. M. Rajput, A. S. Mamman, y J. Catal. 178, 576 (1998).
 [2] H. Baltache, R. Khenata, M. Sahnoun, M. Driz, B. Abbar, y B. Bouhafs, Physica B 344, 334 - 342(2004).
 [3] T. S. Duffy, R. J. Hemley, y H. K. Mao, Phys. Rev. Lett. 74, 1371 (1995).
 [4] M. T. S. Bukowinski, Geophys. Res. Lett. 12, 536 (1985).
 [5] K. J. Chang, y M. L. Cohen, Phys. Rev. B 30, 4774 (1984).
 [6] P. Blaha, K. Schwarz, y J. Luitz, WIEN97, A Full Potential Linearized Augmented Plane Wave Package for Calculating Crystal Properties (Karlheinz Schwarz, Techn. Universität Wien, Austria), 1999. ISBN 3-9501031-0-4.
 [7] J. P. Perdew, K. Burke, y M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett, 3865 (1996).
 [8] Y. Fei, Y. Fei, y A. Meniral. 84, 272, (1999).
 [9] H. K. Mao, y P. M. Bell, J. Geophys Research Solid Earth. 84, 4533 (1979)

PREDICCIONES Y RESULTADOS EXPERIMENTALES DE LA CARACTERIZACIÓN MAGNÉTICA Y ESTRUCTURAL DE LA BaM DOPADA CON UN CATIÓN EN LOS SITIOS DEL HIERRO

PREDICTIONS AND EXPERIMENTAL RESULTS OF MAGNETIC AND STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF BaM DOPPED WITH ONE CATION IN THE FE SITES

P. A. MARIÑOS-CASTELLANOS^a, C. PUPO-PALMA^a Y J. MATILLAS-ARIAS^b

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

b) Facultad de Física, Universidad de Oriente; gutierrez@oriente.cu†

† autor para la correspondencia

En este trabajo, partiendo del modelo de distribución de cationes en hexaferritas dopadas se calculan la magnetización de saturación y la constante de anisotropía magnética, K_1 , en función de la cantidad de dopante por fórmula unidad y en función de su distribución en los sitios del hierro para hexaferritas de Bario tipo M dopadas con Al, Ti, Sn y Co en pequeñas cantidades de estas. Luego los resultados anteriores se comparan con los resultados experimentales de la caracterización magnética y estructural de estos sistemas.

La investigación demostró que la magnetización de saturación y la constante de anisotropía dependen del aporte de cada sitio del hierro a la magnetización de la muestra como un todo tanto en la muestra sin dopar como en las muestras dopadas a pequeñas concentraciones de los iones sustitutos, así como que el comportamiento de otros parámetros magnéticos no intrínsecos están modulados por este comportamiento.

Las muestras fueron obtenidas por el método cerámico tradicional y su caracterización se realizó refinando los patrones de difracción de rayos X para obtener los valores experimentales de la distribución de cationes en cada uno de los sitios cristalográficos del hierro en la celda unidad de la BaM.

La caracterización magnética fue realizada en un magnetómetro de muestra rotante (RSM) para el estudio de la anisotropía magnética de cada una de las muestras que componen cada sistema, y con un magnetómetro de la muestra vibrante para la determinación de los restantes parámetros magnéticos. Los resultados fueron comparados con las predicciones teóricas obtenidas en el modelo sobre distribución de los sitios cristalográficos, aplicado a estos sistemas.

Utilizando el modelo de distribución de cationes en los sitios del hierro en el interior de la estructura de la BaM se calcularon la distribución de cationes [1,2] de hierro y de cada uno de los dopantes, y con ello fue determinado la magnetización de saturación teórica [2], y la constante de anisotropía K_1 [3].

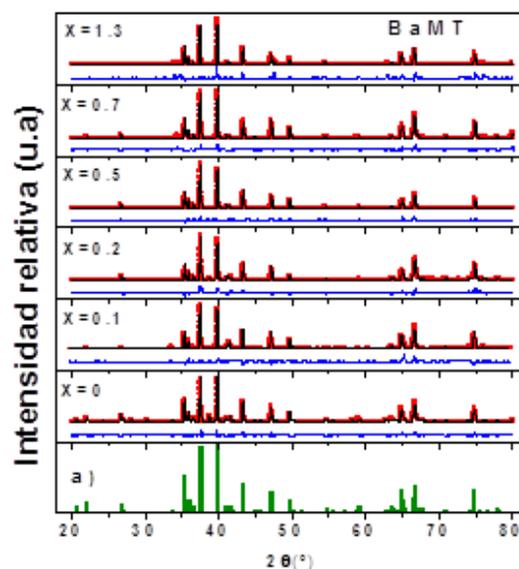


Figura 1. Patrones de difracción de rayos X refinados en función de 2θ utilizando la concentración por fórmula unidad como parámetro para las muestras del sistema BaM+Ti_x.

En la figura se observa la alta pureza de la fase de hexaferrita de bario tipo M para los compuestos de este sistema, excepto para las muestras ($x = 0.0$ y 1.3). También se pueden observar variaciones de la intensidad relativa respecto a la muestra sin dopar que demuestran la ocurrencia de sustituciones de los iones Fe^{3+} por Ti^{4+} y pequeñas permutaciones en las posiciones de las líneas que implican distorsiones mínimas de la celda

unidad con la concentración del dopante debido a que la diferencia entre el radio iónico del Ti^{4+} respecto al Fe^{3+} es de un 4,5%.

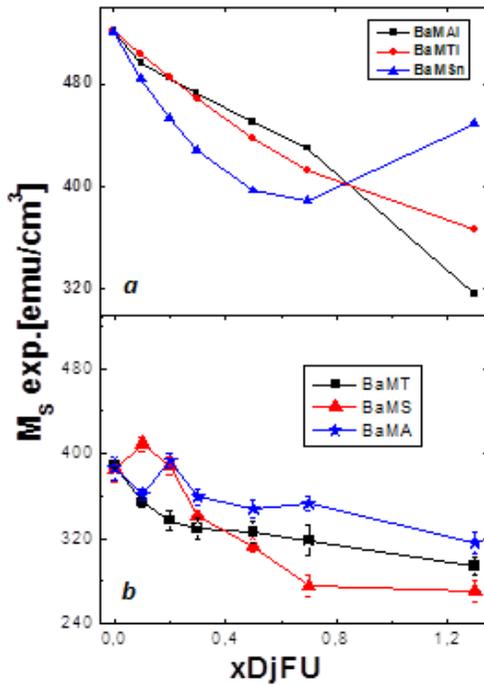


Figura 2. a) Comparación entre las dependencias de la magnetización de saturación teórica con x para los tres sistemas y b) comparación entre las dependencias de la magnetización de saturación experimental con x para los tres sistemas.

En la figura se observa un comportamiento polinomial, cuyo grado depende de la Z del dopante, disminuyendo la magnetización de saturación con el número atómico, excepto para el dopaje con Sn, que tiende a aumentar a partir de $x=0.7$ debido a la disminución entre las distancias interatómicas como consecuencia del mayor radio iónico del Sn^{4+} .

Comparando las figuras 2a y 2b es notorio que en los resultados experimentales y teóricos se mantiene el mismo orden de disminución de la magnetización de saturación con el dopante hasta $x=0.3$; a partir de ahí la magnetización de saturación del Sn decrece más rápidamente debido a la mayor fracción de poro para este sistema. Valores experimentales menores que los predichos teóricamente se deben a la presencia de poros en todas las muestras para todos los sistemas.

En esta figura se aprecia que el comportamiento de este parámetro, de acuerdo a las predicciones teóricas, depende del número atómico del dopante incluido, que en todos los casos aumento polinomialmente con la cantidad de dopante y el valor de n de la aproximación polinomial depende del radio

iónico del catión sustituto considerado. En el caso del dopaje con Sn, la tendencia a disminuir a partir de $x=0.5$ se debe a que a partir de este valor las tensiones en el interior de la red cristalina son tales que tienden a disminuir la constante de anisotropía.

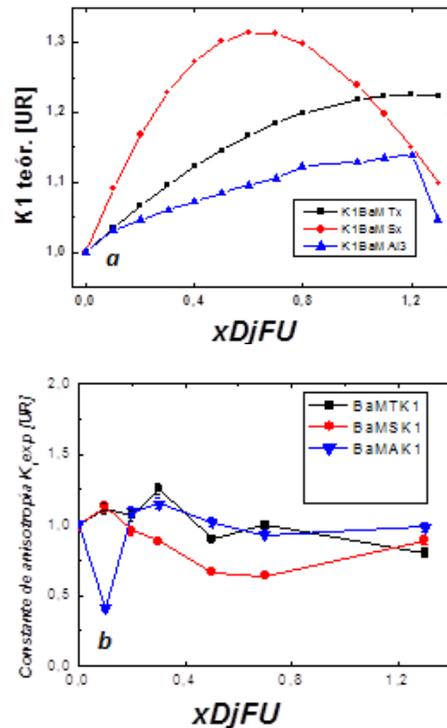


Figura 3. a) Comparación entre las dependencias de la constante de anisotropía K_1 teórica con x para los tres sistemas y b) comparación entre las dependencias de las constantes de anisotropía K_1 experimentales con x para los tres sistemas.

Comparando las figuras 3 a) y 3 b) se observa que existe una diferencia importante en su comportamiento respecto a las predicciones teóricas, lo cual se debe a que estas últimas solo tienen en cuenta la constante de anisotropía magnética intrínseca del material y los resultados experimentales son la superposición de la anisotropía magnética intrínseca y la anisotropía magnética extrínseca, formada por tensiones entre granos, inclusiones y otras fases presentes.

[1] P.A. Mariño-Castellanos, A.C. Moreno-Borges, G. Orozco-Melgar, J.A. García, E.Govea-Alcaide, *Physica B* 406 (2011) 3130–3136.
 [2] P. A. Mariño-Castellanos, C. Pupo-Palma, R. Ladrón de Guevara-Viltres, Y. Guerra-Dávila, *Revista Cubana de Química*, Vol. XXV, N° 3, 2013.
 [3] J. Qiu, Q. Zhang, M. Gu, *Jornal of Applied Physics* 98, 103905 (2005).

INTERACCIÓN DE LA MORDENITA CON SALES CUATERNARIAS DE AMONIO

MORDENITE INTERACTION OF QUATERNARY AMMONIUM SALTS

M. HERNÁNDEZ^{a†}, Y. COSTA^b Y M. H. FARIAS^c

a) Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, Cuba. mayrap@imre.oc.uh.cu†

b) Grupo de Matemática y Física Computacional, Universidad de las Ciencias Informáticas, La Habana, Cuba. cmarrero@uci.cu

c) Centro de Nanociencias y Nanotecnología (CNyN), Universidad Nacional Autónoma de México. Ensenada, BC, México. mario@cny.n.unam.mx

† autor para la correspondencia.

Palabras clave: reacción en zeolitas 82.33.Jx, física química de surfactantes 82.70.Uv.

El nombre de mecanoquímica se aplica a aquellas reacciones químicas causadas por la energía mecánica [1]. La gran mayoría de estas reacciones simplifican la síntesis de materiales, produciendo una drástica reducción de los tiempos y las temperaturas de reacción.

La mecanoquímica ha sido usada en las zeolitas, produciendo una amorfización de la estructura, con consecuencias en las propiedades químicas y físicas [2]. Otras técnicas han sido desarrolladas en años recientes para alterar las propiedades físicas, químicas, estructurales y de la superficie de zeolitas. Los procesos más usados para este fin incluyen el tratamiento térmico [3]; el tratamiento químico [4]; la aplicación de surfactantes iónicos y/o polares para cambiar su hidrofobicidad [5]; y combinaciones de los anteriores tratamientos [3].

En particular, las pérdidas en el contenido de Al de una zeolita, conocida como desaluminación, tienen un significativo impacto sobre la capacidad de intercambio iónico, la adsorción, la acidez, la estabilidad y la selectividad [3].

En el presente estudio, la mordenita (Si/Al11) fue molida suavemente con sales cuaternarias de amonio reduciendo el contenido de Al en el volumen de la zeolita, y quedando eliminado en la superficie. Las propiedades físico químicas de la mordenita fueron examinadas por XPS y EDS y DRX.

Las sales cuaternarias de amonio (Quats) de grado analítico fueron suministradas por la Fluka. Estas fueron bromuro de Dodecil Trimetil Amonio (NBrC₁₅H₃₄), cloruro de Tetradecil Trimetil Amonio (NCIC₁₇H₃₈) y cloruro de Octadecil Trimetil Amonio (NCIC₂₁H₄₆). La mordenita: Na_{4.6}Al_{4.55}Si_{43.45}O_{96.8.36}·H₂O fue suministrada por la firma Merck.

Las muestras se prepararon a través de la la molienda de los reactivos en relación molar de 10 Mordenita por 1 de Quats (10:1). El proceso de molida de la Mordenita y Quats se efectuó en un mortero de ágata durante 0.5 horas y una hora. La

Mordenita fue también molida durante una hora en el mortero de ágata, para evaluar el efecto del proceso mecanoquímico sin la presencia de Quats. Todos los productos de los tratamientos se lavaron con abundante agua, se filtraron y se secaron en una desecadora por varios días, antes de someterlo a los análisis espectroscópicos.

La Mordenita de partida, la cual no fue sometida a ningún tratamiento, fue incluida en los análisis espectroscópicos como referencia para el resto de las muestras sometidas a diferentes tratamientos.

Tabla I: Concentración atómica relativa del volumen

Descripción	$\frac{Al}{Al+Si}$ (± 0.01)
Volumen	
MOR (mordenita)	0.08
MOR_1H (MOR molida por 1h)	0.08
MOLIDAS (0.5 h)	
MOR12_0.5 (MOR+ NBrC ₁₅ H ₃₄)	0.03
MOR14_0.5 (MOR+ NBrC ₁₇ H ₃₈)	0.02
MOR18_0.5 (MOR+ NBrC ₂₁ H ₄₆)	0.02
MOLIDAS (1h)	
MOR12_1 (MOR+ NBrC ₁₅ H ₃₄)	0.02
MOR14_1 (MOR+ NBrC ₁₇ H ₃₈)	0.02
MOR18_1 (MOR+ NBrC ₂₁ H ₄₆)	0.02

La Tabla I muestra la razón de las concentraciones atómicas de Si y Al para el volumen, como resultado del análisis por EDS. La relación $\frac{Al}{Al+Si}$ no presentó diferencias notables entre MOR y MOR_1H. Este resultado indica que la energía involucradas en la molida en seco en el mortero de ágata no produce pérdidas de Al. La relación $\frac{Al}{Al+Si}$ disminuye con el tratamiento mecanoquímico en presencia de Quats, debido

fundamentalmente a las pérdidas de Al.

La relación $\frac{Al}{Al+Si}$ en la superficie fue medida por XPS. Estos valores coinciden con los observados en el volumen para MOR y MOR_1H. Sin embargo, la señal de Al no fue detectada por XPS para las muestras molidas. Esta drástica reducción demostró una desaluminación total en la superficie.

La disminución de Al en el volumen viene dada por una emigración hacia la superficie provocado fundamentalmente por la disminución drástica del contenido de Al en la superficie y favorecida por el aumento de la temperatura producida por el tratamiento mecanoquímico.

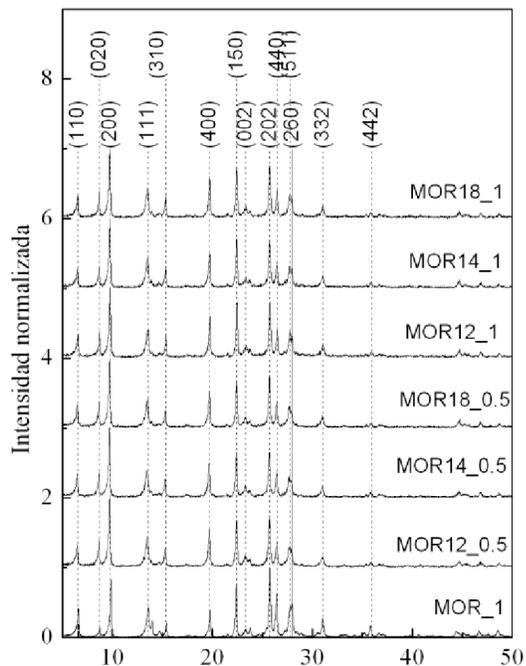


Figura 1. Patrones de difracción de la mordenita molida por 1 hr y la mordenita modificada por la molida por 0.5 y 1h en presencia de Quats.

La Figura 1 muestra la difracción de rayos X de las mordenita modificada por el proceso mecanoquímico en presencia de las Quats. En esta figura, no se aprecian cambios notables de la cristalinidad pero sí ligeras variaciones en la intensidad de los picos. La aparente conservación de la cristalinidad puede ser debida a la incorporación del N+ a la superficie de la Mordenita modificada.

La Mordenita molida en seco en un mortero de ágata no provocó cambios químicos y estructurales. Sin embargo, la Mordenita fue modificada cuando ella es sometida a un similar proceso mecanoquímico en presencia de Quats. Los cambios químicos consistieron en pérdidas de Al, parcial en el volumen y total en la superficie, conservando una aparente cristalinidad. Este trabajo ha sido apoyado financieramente por el proyecto IN111508-3 del programa PAPIIT-DGAPA UNAM. Las investigaciones estuvieron bajo la sabia dirección del Dr. José F. Fernández Bertrán.

- [1] J. F. Fernandez-Bertran. *Pure Appl. Chem.*, 71. 581–586 (1999).
- [2] J. Kosanovic, B. Bronic, I. Subotic, M. Smit, A. Stubicar, T. Tonejc, Tatsuya Yamamoto. *Zeolites*, 13. 261-268 (1993).
- [3] Yunier Garcia-Basabe, Inocente Rodriguez-Iznaga, Louis-Charles de Menorval, Philip Llewellyn, Guillaume Maurin, Dewi W. Lewis, Russell Binions, Miguel Autie, A. Rabdel Ruiz-Salvador. *Microporous and Mesoporous Materials* 135. 187–196 (2010).
- [4] Kyong-Hwan Chung. *Microporous and Mesoporous Materials* 111. 544–550 (2008).
- [5] T. Farias, L.C. de Menorval, J. Zajac, A. Rivera. *Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects* 345. 51-57 (2009).

FIRST STAGES OF POROUS MATERIALS SYNTHESIS STARTING FROM CLINOPTILOLITE: MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS

PRIMEROS ESTADIOS DE LA SÍNTESIS DE MATERIALES POROSOS A PARTIR DE CLINOPTILOLITA: SIMULACIONES DE DINÁMICA MOLECULAR

Y. MACHADO-BATISTA^{a,b}, A. RIVERA^b, L. J. ALVAREZ^c Y A. LAM^{b†}

a) Departamento de Ciencias Básicas, Facultad 2, Universidad de las Ciencias Informáticas (UCI), La Habana, Cuba.

b) Zeolite Engineering Laboratory, Institute of Material Science and Technology (IMRE), University of Havana, Cuba; anabel@fisica.uh.cu†

c) Laboratorio de Simulación. Instituto de Matemáticas, Unidad Cuernavaca. Universidad Nacional Autónoma de México. Cuernavaca, Morelos, México.

†autor para la correspondencia

Palabras clave: Zeolites (81.05.Rm), Synthesis (81.20.Fw), Clinoptilolite (81.05.Rm), Molecular Dynamics simulations (83.10.Rs).

Zeolites are crystalline materials widely used as molecular sieves and catalysts. Their uses in processes which involve large molecules are limited by their microporous structure. That is why in the last years a lot of efforts have been conducted to develop materials with crystalline zeolite type structure beyond the micropore range. Recently, mesoporous materials with pore dimensions between 2 to 10 nm have been developed. However, these materials have several disadvantages such as poor stability and low and weak acidity. Also, they have lower ion exchange capacity than zeolites. The preparation of crystalline mesoporous aluminosilicate materials is difficult because the synthesis conditions that produce mesoporosity are very different from those used for zeolite synthesis [1-4].

In addition, synthesis of porous materials starting from natural sources has attracted considerable interest over the last years based on their low cost and their large potential in different areas. Synthesis of these solids involves a great number of molecular species, such as templates, aluminum and silicon oxides, sodium hydroxide and water. Their self-assembly to obtain a material with a hierarchical porosity often requires complementary techniques to clarify the chemical mechanisms involved. Therefore, the use of computational simulation can contribute to know the chemical details that take place during the synthesis of these materials [5].

On the other hand, simulation of formation of this kind of materials is a challenge due to the simultaneous interplay among hydrophobic forces, electrostatic interactions and silica polymerization. Moreover, the simulation of self-assembly of this kind of materials requires large system sizes and long simulation times [5].

We have performed Molecular dynamics simulations of the first stages of the synthesis processes of hierarchical materials using clinoptilolite framework as a source of silicon and aluminum. Clinoptilolite (CLI) was chosen as raw material because it is the most abundant natural zeolite. The silicon and aluminum sources were obtained cutting the elementary cell of CLI in dimmers, trimmers and tetramers, mimic the action produced to the CLI framework by acid and base attack. These fragments are the sources of silicon and aluminum needed for the synthesis process. The valence of the oxygen atoms were completed with hydrogen atoms. Also hydrogen of Brönsted site are included in the Al dimmers, which are handled with different interatomic potential parameters. In principle hydrogens used to complete valences could experience repulsive intermolecular interactions among them. More rapid aggregation around surfactant should be observed if the oxygens were charged. However, the silicon sources frequently used in synthesis are not charged and have hydrogen in the structure, i.e., tetraethoxysilane (TEOS) and tetramethoxysilane (TMOS) [4].

In that way, we use in the simulation 54 dimmers, 27 trimmers and 27 tetramers. 27 dimmers have one aluminum atom and one silicon atom and the rest of the dimmers are pure silicon. The silicon/aluminum ratio in the simulation box is 10 as was previously used by Mokaya et al for the synthesis of mesoporous aluminosilicates [2]. 27 decyltrimethylammonium bromide surfactant (DeTAB) and 3326 water molecules were included in the simulation box. The SPC/E potential was employed to model the interaction present in water molecules [6]. The DeTAB molecule and the oligomers employed were modeled using the potential employed before by Jorge et al [7]. The

charges used for aluminum and the hydrogen of the Brönsted site were 0.8292 e and 0.5 e, respectively. The Al-O distance was kept fixed at 1.78 Å. The potential taken from references 6 and 7 have been successfully used to model the synthesis process of mesoporous silica [7].

Molecular dynamics simulations were carried out using the DL_POLY molecular dynamics simulation package version 2.0 [8]. The equations of motion were integrated with the Verlet leapfrog algorithm and a time step of 2 fs was used. The NpT ensemble was employed in all simulations, with the temperature and pressure fixed at 300 K and 1 bar, respectively, applying the Nöse-Hoover thermostat and barostat. The initial simulation box was cubic, with size equal to 54.5 Å. Periodic boundary conditions were applied in all cartesian directions. The Ewald method was applied to deal with long-range electrostatic interactions. The cutoff of the short-range was 10 Å. The total simulation time was 22 ns. Figure 1 shows different stages of the simulation (water molecules were not included).

At the beginning of the simulation molecules are randomly distributed. During the simulation, surfactant molecules approach each other forming three small aggregates, with average aggregation number (Nagg) equal 6. The form of these aggregates is approximately spherical and the diameters can reach 25 Å, see the circle in Figure 1d.

As can be seen the surfactant monomers do not arrange in a well formed spherical micelle, they fold back their tails in order to avoid the interaction with water.

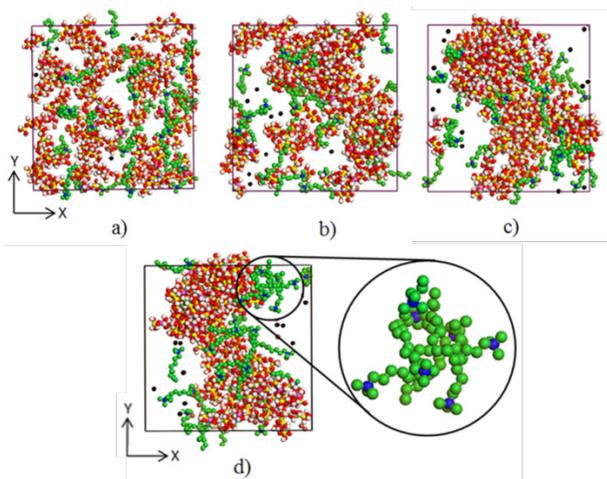


Figure 1. Snapshot of simulation box for different simulated times, a) $t=0$ ns, b) $t=6.13$ ns, c) $t=12.13$ ns and d) $t=22$ ns. The surfactant N atom is represented in blue while carbon in green and bromide in black. In the oligomers, oxygens are red, hydrogens are white, silicon is yellow and aluminum purple.

Also, micelles formed have lower Nagg than the one observed in other simulations [7], due to the different simulation conditions. As it is well known the micellisation process strongly depends on the experimental conditions.

At the end of the simulation, silicon and aluminum oligomers

are arranged forming layers where neither water nor surfactants are included. Previous experimental studies have observed the formation of layered silica in few days synthesis process [1].

Further studies have shown that the presence of Al does not have any influence on structural ordering of the mesophases obtaining layered aluminosilicates via hydrothermal synthesis [2].

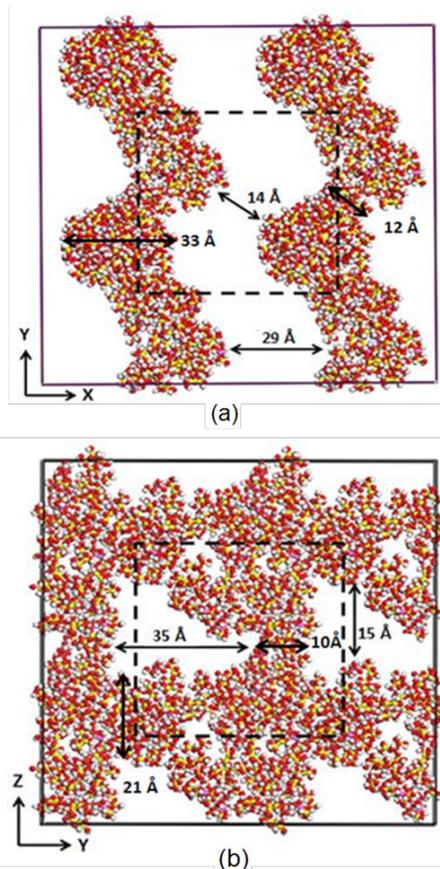


Figure 2. Different views of oligomers arrangement at the end of the simulation. The simulation box, depicted in dashed line, has been replicated in all directions. Water molecules and surfactant are not included. Color codes are the same as those of Fig. 1.

Figure 2 shows the simulation box replicated in all directions at the end of the simulation.

It is possible to observe the formation of layered mesophases that extend on the XY plane (Fig. 2a). The layer formed has a sinusoidal form. The minimum lamellar distance is approximately 14 Å, while the largest is 29 Å. It is possible to observe the formation of one irregular pore system with dimensions of 15 x 35 Å (see Fig. 2b) on the YZ plane. As can be seen in Figure 2, the walls thickness change both in the layer and in the pore. They are between 12 to 33 Å in the first case and change from 10 to 21 Å in the second case. The simulation results are suggesting that the new material has a framework different to the clinoptilolite, with an emerging mesoporous structure.

The presence of such porosity also suggests that a lamellar to hexagonal phase arrangement could be taking place. It is

important to note that mesoporous materials like MCM-41 have hexagonal phase arrangement [5].

At the end of the simulation the Si-Si distances are lower than the Al-Al. This is an expected result because there is more silicon atoms than aluminum ones. Also, the aluminum and silicon distribution obtained are in such way that they follow the avoidance rules of Al in zeolites, i.e. the Lowenstein and Dempsey rules [9,10]. In those dimmers that contain one Al atom, the silicon atom can get closer to other silicon atoms, favoring the possibility to form a bond. Dimmers are the fragments that can be found closer to micelles due to their small size. They can move more easily in the system and approximate faster to the micelle surface. However, Al is located farther from the micelle. This implies that the dimmers of aluminum approach surfactants oriented the Si atoms closer to micelle than Al.

ACKNOWLEDGMENT

We thank The Academy of Sciences for the Developing World (TWAS) for the research grants no. 04-033 RG/CHE/LA. Also, to CONACYT-Cuba CITMA project 000.0452. Furthermore, A. Lam thanks SECITI-CLAF research scholarship.

-
- [1] Y. Xia, R. Mokaya and J. J. Titman, *J. Phys. Chem. B* 108, 11361–11367 (2004).
 - [2] Y. Xia and R. Mokaya, *J. Phys. Chem. B* 110, 9122–9131 (2006).
 - [3] Y. Xia and R. Mokaya, *Microp. Mesop. Mat.* 94, 295–303 (2006).
 - [4] S. A. Pelster, Schrader and F. Schüth, *J. Am. Chem. Soc.* 128, 4310–4317 (2006).
 - [5] L. Jin, S. M. Auerbach and P. A. Monson, *Langmuir* 29, 766 (2013).
 - [6] H.J.C. Berendsen, J. R. Grigera and T.P. Straatsma, *J. Phys. Chem.* 91 (24), 6269 (1987).
 - [7] M. Jorge, J.R.B. Gomes, M.N.D.S. Cordeiro and N.A. Seaton, *J. Phys. Chem. B*, 113, 708 (2009).
 - [8] W. Smith and T. Forester, *J. Mol. Graph.* 14, 136 (1996).
 - [9] W. Lowenstein, *Am. Mineral.* 39, 92 (1954)
 - [10] E. Dempsey, *J. Catal.* 33, 497 (1974); *Ibid.* 39, 155, (1975).

SEMICLASSICAL MODELLING OF FINITE-PULSE EXCITATION EFFECTS ON THE PREDISSOCIATION DYNAMICS OF NaI

MODELACIÓN SEMICLÁSICA DE LOS EFECTOS DE LA EXCITACIÓN MEDIANTE PULSOS DE DURACIÓN FINITA SOBRE LA DINÁMICA DE PREDISOCIACIÓN DE NaI

A. MARTÍNEZ MESA^{†a}, P. SAALFRANK^b

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

b) Institute for Chemistry, Universität Potsdam, Germany

† corresponding author

PACS: Semiclassical theories in atomic physics, 31.15.xg; Predissociation, 33.80.Gj; Ultrafast dynamics, 87.15.ht

During the last decades, pump-probe spectroscopy has placed itself among the most powerful tools available to investigate, at a microscopic level, the underlying mechanisms of many phenomena in physics, chemistry and biology. On the other hand, addressing fundamental processes taking place in many-body systems from the time-resolved spectroscopy perspective, often requires auxiliary theoretical calculations to support the interpretation of empirical data. However, rigorous time-dependent quantum mechanical calculations are computationally very demanding for systems with more than a few degrees of freedom. At present, simulations of pump-probe spectra for many-body molecular systems appear to be out of reach, unless a theoretical treatment relying on a classical (or semiclassical) approximation is used.

An additional source of complexity in the simulation of photochemical events is the nearly ubiquitous presence of conical intersections or avoided crossings, giving rise to the manifestation of non-adiabatic effects. Starting from the pioneering experiments of Zewail and co-workers on probing the real-time dynamics of NaI predissociation using (femtosecond) electromagnetic fields [1, 2], this reaction has evolved into a paradigm of ultrafast dynamics involving strong non-adiabatic couplings. The Landau-Zener transitions at the crossing region of the two electronic states involved in the process give rise to marked interference patterns. Moreover, the relative phase between the wavepackets moving on the dissociative and on the bound potential energy curves can be engineered to inhibit (or enhance) the fragmentation channel [3, 4].

The theoretical investigation of electronic transitions induced by finite-length pulses demands the actual profile of the exciting electromagnetic field to be explicitly incorporated into the model. Nevertheless, it makes more difficult to carry out numerically converged simulations based on semiclassical schemes such as surface-hopping techniques. The reason is

that field-induced couplings may be appreciably delocalized in space, rendering the application of Tully's fewest switches scheme [5] inefficient. A possible route to overcome these difficulties would be to handle these couplings within the initial conditions of the semiclassical calculations, i.e., to implicitly account for the effects of the various pump pulse parameters (e.g, the pulse width and chirp) via a suitable sampling function. This simple procedure, though approximate, has a fairly lower computational cost compared to more sophisticated simulation techniques, what makes it very appealing concerning its extension to the analysis of non-adiabatic dynamics in large molecular systems. In this work, we aim to assess the validity of this approach to study photoinduced phenomena in presence of strong non-adiabatic effects. By using the electronic predissociation of NaI as a numerical example, we undertake the modelling of dynamical phenomena where interference between the wavepackets evolving on different electronic states plays a major role.

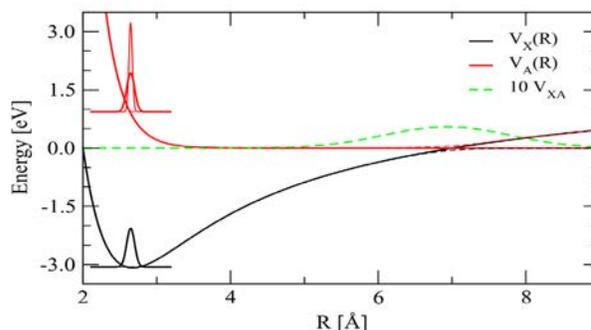


Figure 1. Diabatic potential energy curves V_X , V_A and non-adiabatic coupling element V_{XA} for a NaI molecule. The probability distribution corresponding to the vibrational ground state on the ionic diabatic state is also shown. On the upper potential energy curve, the thick solid line represents the initial wavefunction corresponding to the photoexcitation by a zero-width laser pulse. The thin solid line is the wavepacket promoted by a finite-width pulse with FWHM of 5 fs.

We consider the promotion of a NaI molecule from the $X(^1\Sigma^+)$ ionic state to $A(0^+)$ neutral state, upon absorption of photons

from a (weak) ultrashort laser pulse. The diabatic states V_X and V_A are also coupled by a non-adiabatic matrix element V_{XA} . The explicit functions defining the potential energy curves V_X , V_A and V_{XA} were taken from the literature [6]. These potential energy curves, together with the vibrational ground state on the electronic state X , are represented in figure 1. For an infinitely short laser pulse, the wavepacket promoted onto the neutral diabatic state is the exact copy of that in the vibronic ground state. However, as it is shown in this diagram, even for narrow finite-width pulses acting on the molecule during a few femtoseconds, the spatial extent of the initial wavefunction on the excited state gets strongly suppressed. Such contraction owes to the resonant-filtering of the phase space density, within the limits imposed by the spectral width of the electromagnetic field.

To assess the influence of the finite pulse duration on the subpicosecond dynamics of the target system, the time evolution of the wavepackets evolving on the dissociative $\Psi_A(R, t)$ and the bound $\Psi_X(R, t)$ channels was analysed by numerically solving the time-dependent Schrödinger equation:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \Psi_X \\ \Psi_A \end{pmatrix} = \left[\begin{pmatrix} \hat{T} + \hat{V}_X & \hat{V}_{XA} \\ \hat{V}_{XA} & \hat{T} + \hat{V}_A \end{pmatrix} + \hat{W} \right] \begin{pmatrix} \Psi_X \\ \Psi_A \end{pmatrix} \quad (1)$$

In equation (1), \hat{T} is the kinetic energy operator and $W(t) = -\mu(R)E(t)(|X\rangle\langle A| + |A\rangle\langle X|)$ is the field-molecule interaction within the dipole approximation, whereas $\mu(R)$ stands for the transition dipole function which is assumed to be constant, and $E(t) = f(t; \tau) \cos(\omega t)$ is the component of the external electric field along the molecular axis. The function $f(t; \tau)$ is the envelope of the laser pulse of length τ (Full Width at Half Maximum, FWHM), while ω designates the central frequency of the electromagnetic field.

The time-dependent propagation scheme employed in the simulation of the non-adiabatic dynamics is based on the decomposition of the time evolution operator according to the Trotter expansion [7, 8], combined with a finite-difference representation of the molecular Hamiltonian on a uniform mesh containing 4096 points. The initial wavefunction $\Psi_X(R, t)$ corresponds to the vibrational ground state of the of the diabatic state X , computed using a Numerov's scheme [9]. Cayley's form of the matrix exponential [10] was found to be accurate enough to represent the effect of the kinetic energy operator on the evolution of the molecular wavefunction. On the other hand, the modification of the wavepacket as a consequence of the interactions (including non-adiabatic couplings) is calculated utilizing the second-order approximation to the exponential of the potential energy introduced in Ref. [11].

The surface-hopping calculations of the predissociation dynamics are based in the numerical implementation of the Tully's fewest switches algorithm [5], i.e., the time evolution of the electronic degrees of freedom is treated quantum mechanically while the forces driving the classical nuclear dynamics are derived from the diabatic potential energy curves

V_X and V_A . A swarm of N independent trajectories resembling the nuclear wavepacket at every point in time, was propagated according to the classical equations of motion. Individual trajectories are allowed to hop between the potential energy curves in order to match the time-dependent occupation probability of the electronic states. Observables are calculated as statistical averages over this ensemble of trajectories.

In order to start the propagation of the nuclear trajectories, initial conditions need to be specified. During the generation of the initial positions and momenta, the energetic constraints following from the finite spectral width of the laser pulse have to be taken into account. The classical limit $\rho(R, t)$ of the probability distribution, consistent with the initial excited state wavefunction calculated within first-order perturbation theory is:

$$\rho(R, P, t) = e^{-\mathcal{L}t} \rho_A(R, P, t=0) \quad (2)$$

where \mathcal{L} is the classical Liouville operator. Following the procedure outlined in [12], the distribution $\rho_A(R, P, t=0)$ can be straightforwardly derived to be:

$$\rho_A(R, P, t=0) \sim \int dt' e^{-\mathcal{L}t'} W_g(t', D_{AX} - \hbar\omega) \rho_X(R, P, t=0) \quad (3)$$

where W_g denotes the Wigner transform of the pulse envelop $f(t; \tau)$ and $D_{AX} = V_A - V_X$ is the energy difference between the two electronic states.

Equation (3) can be translated into a simulation scheme with three main steps:

- (i) generate an ensemble of trajectories which sample the phase space density ρ_X associated with the initial quantum-mechanical state,
- (ii) randomly choose the "promoted" phase space points at time t' from the distribution given by W_g and
- (iii) undertake the propagation of the nuclear trajectories, governed by the state-specific potentials V_X and V_A as well as the non-adiabatic couplings V_{XA} , starting on the excited electronic state at time t' .

It is obvious that this implementation allows to incorporate the explicit shape of the excitation pulse, while retaining the simplicity of standard surface-hopping calculations (i.e., those carried out assuming vertical excitations exclusively).

First we consider the performance of the semiclassical surface-hopping method for this specific problem by considering a δ -like excitation, i.e., the case where, after the initial electronic transition, the two electronic states are solely coupled by the non-adiabatic matrix element V_{XA} . As it is shown in figure 2, the population instantaneously transferred to the electronic state A evolves on this potential energy surface for about 100 fs. At this point in time, the wavepacket approaches the

degeneracy region of the diabatic potentials and, as a result of the non-adiabatic couplings, around 98% of the population is brought back on the electronic state X . It can be seen, that the the surface-hopping model also predicts an extensive repopulation of the X state (95%) but somewhat lower than the quantum mechanical calculations. Up to 3 ps after the photoexcitation, it becomes striking that the semiclassical hopping algorithm systematically predicts the correct timing of the non-adiabatic events, but the semiclassical transition probability underestimates its quantum counterpart. Such behaviour can be attributed to frustrated hops, where the trajectories do not change the electronic state due to violation of energy conservation. Though several prescriptions have been devised and tested to alleviate this deficiency, such as the fewest-switches with time-uncertainty method, for the time being we just ignored classically forbidden transitions. If they are necessary to attain an accurate description of specific phenomena, they can be incorporated into the surface-hopping simulations at the same computational expense than for the standard algorithm.

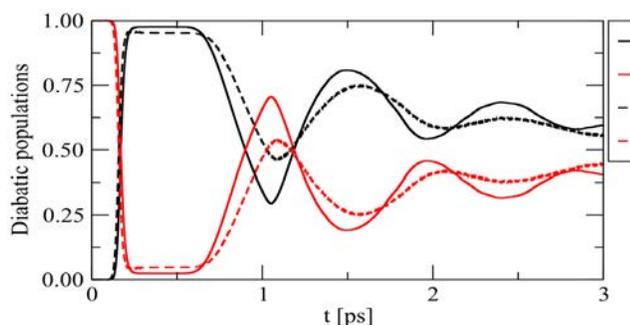


Figure 2. Transient diabatic state populations computed via quantum wavepacket propagation, $P_{X'}^{qm}(t)$ and $P_A^{qm}(t)$, and the surface-hopping scheme, $P_{X'}^{sh}(t)$ and $P_A^{sh}(t)$. The influence of the finite-width of the pump pulse on the non-adiabatic dynamics was neglected in these calculations.

The time-dependent density distribution, corresponding to the vibrations of salt molecules triggered by a 20 fs pump pulse, is depicted in figure 3. It can be seen, that upon the photoexcitation the wavepacket stays localized in space, oscillating back and forth between the inner and outer turning points. The overall agreement of the quantum and the semiclassical density distributions is striking, the latter exhibiting a somewhat larger vibrational amplitude. Hence, the vibrational period obtained in the semiclassical calculations is 12% smaller than the quantum mechanical result. Globally, the application of the surface-hopping algorithm combined with the filtering of finite pulse effects into the initial conditions is found to yield a qualitatively correct picture of the predissociation dynamics for pulse lengths up to a few tens of femtoseconds. In general, the level of correspondence between the quantum and the semiclassical calculations is similar for other pulse shapes considered and for rather large pulse chirps.

In summary, the filtering of the influence of the waveform of the pump pulse into the initial conditions can be applied to the simulation of photoinduced dynamical processes where the use of a δ -function pulse may become a severe drawback for the

quantitative analysis. The time-dependent predissociation rates of NaI molecules are largely governed by strong interference effects, so the target system is intended to provide lower bounds of the applicability of the method for the numerical simulation of non-adiabatic dynamics. The proposed semiclassical methodology predicts precise branching ratios between the bound and the dissociative channels, whereas it gives a correct qualitative picture of the dynamics of the excited wavepacket.

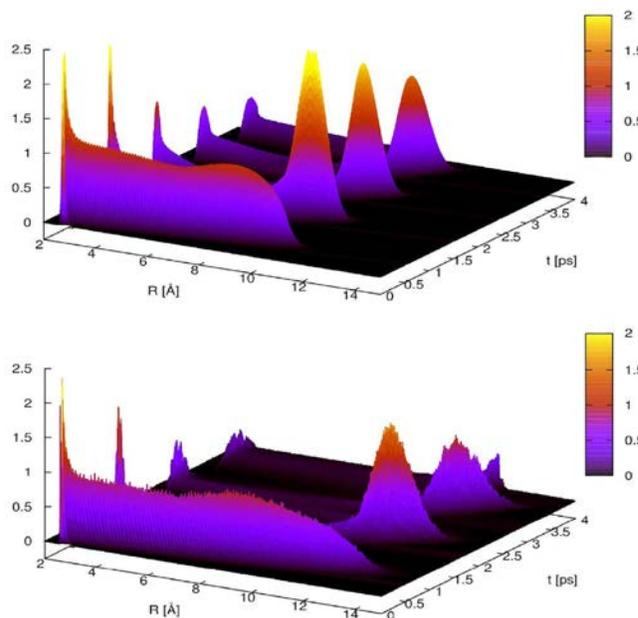


Figure 3. Time-dependent density distribution, as evaluated via quantum wavepacket propagation (upper panel) and semiclassical surface-hopping calculations (bottom panel). The initial wavepacket is promoted onto the A electronic state by a Gaussian laser pulse with FWHM of 20 fs.

The present analysis paves the way to employ the mapping of the influence of the finite pulse width into the initial conditions for surface-hopping simulations, to investigate the possibility to achieve a limited control of the non-adiabatic dynamics by tailoring the pump pulse.

- [1] T. D. Rose, M. J. Rosker, A. H. Zewail, *J. Chem. Phys.*, 6672 (1988).
- [2] M. J. Rosker, T. s. Rose, A. H. Zewail, *Chem. Phys. Lett.* 146, 175 (1988).
- [3] H. Dietz, V. Engel, *Chem. Phys. Lett.*, 258 (1996).
- [4] Y. Liu, Y. Liu, Q. Gong, *Eur. Phys. Lett.* 101, 68006 (2013).
- [5] J. Tully, *J. Chem. Phys.* 93, 1061 (1990).
- [6] V. Engel, H. Metiu, *J. Chem. Phys.* 90, 6116 (1989).
- [7] H. Trotter, *Proc. Am. Math. Soc.*, 10, 545 (1959).
- [8] M. D. Feit, J. A. Fleck, A. Steiger, *J. Comput. Phys.* 47, 412 (1982).
- [9] G. Delgado-Barrio, A. M. Cortina, A. Varadt, P. Mareca, P. Villarreal, S. Miret-Artes, *J. Comput. Chem.* 35, 208 (2014).

[10] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, Numerical Recipes in Fortran 90, 2nd. ed., Cambridge University Press (1996).

[11] X. Chen, V. S. Batista, J. Chem. Phys. 125, 124313 (2006).

[12] C. Meier, V. Engel, Phys. Chem. Chem. Phys. 4, 5014 (2002).

CARACTERIZACIÓN COMPUTACIONAL DE LA DIFUSIÓN EN UN SISTEMA UNIDIMENSIONAL DE PARTÍCULAS INTERACTUANTES EN RÉGIMEN HIDRODINÁMICO

COMPUTATIONAL CHARACTERIZATION OF ONE DIMENSIONAL DIFFUSION OF A SYSTEM OF PARTICLES ON HYDRODYNAMIC REGIME

E. NAVAS-CONYEDO^{at}, C. M. PÉREZ-REYES^a, C. TORRES-PUPO^a, Y. COSTA-MARRERO^a, J. GULÍN-GONZÁLEZ^a

a) Grupo de Matemática y Física Computacional. Universidad de las Ciencias Informáticas (UCI), Carretera a San Antonio de los Baños, Km 2 ½, Torrens, Boyeros, La Habana, Cuba. CP. 19370; enavas@uci.cu[†]

[†] autor para la correspondencia

Keywords: Anomalous diffusion, single file diffusion, multiparticle collision dynamic PACS: 47.11.-j, 02.70.-c, 47.55.nb.

A partir de un modelo basado en un conjunto de partículas interactuantes según un potencial aproximado de esfera semirígida con régimen hidrodinámico simulado a través de la técnica dinámica de múltiples colisiones, se obtiene la aproximación del operador propagador difusivo bajo distintas condiciones iniciales. Se evalúa el impacto de las condiciones iniciales en la manifestación de la difusión anómala y sus parámetros así como la posibilidad de aplicar una aproximación local de las ecuaciones de la difusión dividiendo el dominio en secciones.

From a computational simulation for an softsphere approximation potential interacting particles system with hydrodynamic regime, granded by multiparticle collision dynamic techniques, an approximation for diffusive propagator is obtained on many initial conditions. The impact of initial conditions on diffusion parameters are evaluated and also the possibility of local sectional diffusion application.

INTRODUCCIÓN

La modelación de la difusión en sistemas con alto confinamiento, en los que las estructuras que lo componen están fuertemente correlacionadas, es de interés por su potencial en la descripción predictiva de fenómenos complejos en sistemas biológicos. Para estos sistemas, en diversas situaciones, determinadas por las características morfológicas, termodinámicas e iniciales presentes, los modelos físico estadísticos tradicionales no son aplicables y se hace necesario acudir a modelos más generales como los que estudian la difusión anómala [1]. Un ejemplo característico lo constituye el comportamiento del microfluído sanguíneo presente en los capilares de los alviolos pulmonares donde el ancho de los capilares es comparable con el tamaño efectivo de los glóbulos rojos (GR) los que interactúan entre ellos de forma tal que no pueden sobrepasarse unos a los otros, este tipo de comportamiento se conoce en la literatura como difusión en una sola fila (*single file diffusion*, en inglés) [2, 3].

El tamaño típico de un GR es aproximadamente 7.5 μm , pero este adapta su forma en correspondencia con las características del fluido convirtiéndose la interacción hidrodinámica un factor fundamental cuando el ancho del capilar oscila entre 3 y 8 μm [4, 5, 6], en estas condiciones el movimiento de los

GR están muy correlacionados con un efecto marcado por el resultado de la interacción con las paredes del capilar y el plasma sanguíneo presente entre los GR adyacentes, que se manifiesta en el comportamiento anómalo de la difusión [6].

Una de las características distintivas de la difusión anómala es la dependencia como ley de potencia fraccionaria con el tiempo del desplazamiento medio cuadrático para valores de tiempo grandes, según la ecuación (1) [2] donde D_q es conocido como coeficiente de difusión anómalo y q exponente anómalo, en el caso específico de la difusión en una sola fila la tendencia general es a que $q=1/2$.

Las principales técnicas teóricas utilizadas para la descripción de la difusión anómala es el modelo del caminante aleatorio en espacio y tiempo continuo (CRTW por sus siglas en inglés) [7], la ecuación en derivadas fraccionarias de Fokker-Plank (FP) [8] y la ecuación principal de evolución (*ME: Master Equation* en Inglés) [9, 7], ver ecuación (2). Esta última es muy difícil de aplicar pues es necesario conocer las características del operador de evolución \hat{M} , el cual puede ser no lineal en ciertos dominios y depende de las características morfológicas e iniciales, además no es posible a priori conocer con exactitud

su comportamiento siendo necesario utilizar información adicional a partir de datos experimentales o simulaciones computacionales.

$$rms_q(t) = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = 2D_q t^q \quad (1)$$

$$\rho(x, t) = \hat{M}(x, t, \rho(x, t))\rho(x, 0) \quad (2)$$

Desde el punto de vista computacional la técnica ME brinda la posibilidad de obtener una aproximación a su operador puesto que este es la solución de la ecuación (2) cuando la función de densidad de partículas posee como condición inicial una aproximación a $\rho(x, 0) \approx \delta(x)$ donde $\delta(x)$ es la delta de Dirac. La mayor dificultad de su aplicación radica en su no linealidad pues en general $\rho(x, t) = \hat{M}(\rho_1(x, 0) + \rho_2(x, 0)) \neq \hat{M}\rho_1(x, 0) + \hat{M}\rho_2(x, 0)$ y el valor de la densidad en cierta posición y tiempo está correlacionada con las existentes en todo el dominio para tiempos anteriores [7]. En el presente trabajo mostramos a través del uso de herramientas computacionales aplicadas a un sistema unidimensional de partículas interactuantes en régimen hidrodinámico, simulado utilizando la técnica computacional de colisiones múltiples (MPC) para el fluido y dinámica molecular (GCMD) para un ensemble gran canónico, la posibilidad de dividir el sistema de estudio en elementos de longitud S , de forma tal, que si la función de densidad inicial se subdivide en estos intervalos según $\rho_o(x) = \rho(x, 0) = \sum_i g_i(x)$ donde $g_i(x) = \rho_o(x)(\Theta(x - nS) - \Theta(x - (n+1)S))$ con $n \in \mathbb{Z}$ y Θ la función de paso unitario, se pueda linealizar el operador \hat{M} como $\rho(x, t) = \sum_i \hat{M}g_i(x)$. Esta propuesta permite acotar el dominio de estudio para el operador de evolución pudiéndose extender su aplicación al resto del dominio.

MODELO COMPUTACIONAL

Como sistema de estudio hemos escogido una simplificación unidimensional de un conjunto de N GR dentro de un capilar de longitud L y ancho W que interactúa bajo un potencial modificado similar a los utilizados en las referencias [10, 11] tipo esfera semirígida según la ecuación (3), el cual representa de forma efectiva la plasticidad de los GR de tamaño máximo d , que poseen producto del confinamiento una distancia límite d_h para sus acercamiento, siendo r la distancia entre los centros geométricos de dos GR vecinos, ver figura 1. La evolución de los GR se realiza utilizando la técnica computacional GCMD [12].

$$U(r) = \begin{cases} \infty & r \leq d_h \\ 20K_B T \exp(-100\|r - d_h\|) & d_h \leq r < d \\ 0 & r \geq d \end{cases} \quad (3)$$

El fluido circundante, en este caso el plasma sanguíneo, es simulado a través de la técnica computacional MPC en su variante que incluye de manera efectiva un termostato de Andersen denominada MPC-AT-a, ver las referencias [13, 14], la cual subdivide al fluido solvente en un conjunto de N_s partículas distribuido en M cajas de simulación de origen aleatorio para lograr invarianza galileana, que poseen una evolución determinada por dos pasos. El primer paso simula

las interacciones entre las partículas del fluido a través del intercambio de momento lineal en cada caja conservando el momento total y la energía, ecuación (4), donde V_j^{CM} es la velocidad del centro de masa de las partículas de la caja j que poseen masa m_j y v_i^{rand} es generado aleatoriamente según una distribución de Maxwell-Boltzman para la energía térmica $K_B T$. En el segundo las partículas se mueven libremente en trayectorias balísticas, ecuación (5). La interacción entre los GR y el fluido se realiza a través de su inclusión en el paso de colisiones en cada caja. Este método híbrido ha obtenido resultados correctos en varias simulaciones similares al propuesto [14, 15].

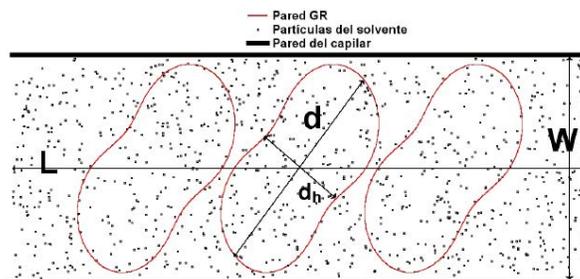


Figura 1. Diseño estructural del sistema de estudio.

$$\tilde{v}_i = V_j^{CM} + v_i^{rand} - \frac{\sum_{i \in Box_j} m_i v_i^{rand}}{\sum_{i \in Box_j} m_i} \quad (4)$$

$$x_i(t + \Delta t) = x_i(t) + \tilde{v}_i \Delta t \quad (5)$$

La interacción del fluido y los GR con la pared del capilar se ha realizado considerando que una fracción de ellos sufren inversión de sus velocidades, esto de manera efectiva caracteriza el intercambio de momento correspondiente a un fluido newtoniano en la vecindad de una frontera inmóvil [16]. La fracción del solvente que interactúa con las paredes se estima según $\frac{4}{W} \sqrt{\frac{K_B T}{2\pi m}} \Delta T$, donde se ha considerado su comportamiento similar a un gas ideal. Para los GR se ha considerado que al disminuir el ancho del canal la superficie de contacto aumenta en la misma medida que la fracción que sufre intercambio de según $\left(\frac{d-W}{W+d_h}\right)^2$ cuando $W < d$.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Para obtener la aproximación computacional del operador \hat{M} se utilizó un conjunto de $N=500$ partículas de masa $m_p=1$ (unidad de masa) separadas en una distancia de equilibrio $d=1$ (unidad de longitud), de esta forma se logra la mayor concentración en equilibrio como aproximación física a una distribución inicial tipo $g_o(x, N, d, l) \sim \delta(x - L/2)$, ecuación (6) a la que nos referiremos como configuración inicial durante el análisis, donde L es el largo del capilar. La temperatura del sistema fue fijada según $K_B T=1$ (unidad de energía), generando un conjunto de 100 condiciones iniciales aleatorias para las velocidades según la distribución de Maxwell para cada simulación. El ancho del capilar fue escogido como $W=0.99d$, de forma tal que existe una fracción estimada interacción

de los GR con la superficie de 0.01. El largo del capilar es de $L=2000d$, de esta forma se garantiza que exista una fracción de volumen del 45% de GR respecto al volumen total del sistema [5]. El fluido es simulado utilizando MPC-AT-a, usando para el ancho de las cajas $a=d$, existiendo un total de cajas de $N_B=2000$ donde hay un promedio de 10 partículas de masa $m_f=0.01m_p$. Como unidad de tiempo de simulación hemos utilizado $t_o = d\sqrt{2m_p/K_B T}$, utilizando $\Delta t_{MPC}=0.001t_o$ para el lapso de tiempo de las iteraciones de MPC-AT-a y $\Delta t_{GCMD}=0.001t_{MPC}$, de esta forma se logra que la viscosidad del fluido sea alta, correspondiente a un número de Reynolds bajo y estabilidad en la solución [15] lo cual se corresponde con la situación real del fluido sanguíneo. En el eje longitudinal se ha considerado condiciones periódicas de frontera.

$$g(x, N, D, L) = \frac{\Theta(x - \frac{L-Nd}{2}) - \Theta(x - \frac{L+Nd}{2})}{Nd} \quad (6)$$

Las condiciones iniciales se varían cambiando la distribución inicial simulada, utilizando un conjunto de $N=1000$ partículas concentradas separadas en dos paquetes de 500 partículas según:

$$g_s(x) = [g_o(x-0.5S, 500, d, L) + g_o(x+0.5S, 500, d, L)]/2 \quad \text{para } S=\{500, 600, 800\}d.$$

En la figura 2 se observa el comportamiento promedio de la desviación cuadrática media normalizada según la primera iteración $rms(t)/rms(0)$ para los distintos valores de S . Para valores pequeños de tiempo $t/t_o \in \{20, 60\}$ se evidencia un crecimiento lento que va disminuyendo con el aumento de S , este comportamiento se corresponde con el proceso de estabilización de las interacciones entre las partículas y el fluido, con aumento de S estas interacciones están más espacialmente distribuidas contribuyendo a alcanzar más rápido un estado estable para el intercambio de momentum en el paso de colisiones de MPC-AT-a. Para tiempos $t/t_o \in \{20, 60\}$ se observa un incremento promedio casi lineal, en todos los casos de pendiente similar, esto se debe al proceso de desagrupación de las partículas donde prevalece solo la interacción de estas con el fluido provocando una tendencia hacia la difusión normal.

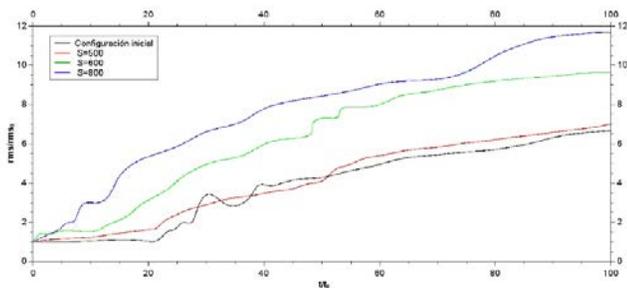


Figure 2. Comportamiento de la desviación cuadrática media normalizada para las distintas condiciones iniciales.

Para $t/t_o > 60$ el proceso de difusión se hace más lento producto de la homogenización de la distribución de las partículas interactuantes lo que provoca un aumento de la

frecuencia de colisiones entre las partículas, con un aumento de las correlaciones que desencadenan un comportamiento anómalo con una dependencia próxima $rms/rms_o \propto \sqrt{t/t_o}$, con el aumento de S se observa que el valor de tiempo donde se retoma el comportamiento anómalo es menor pues su aumento contribuye a la homogenización de la distribución de partículas. Este comportamiento general es muy similar al obtenido en simulaciones bidimensionales en la referencia [17].

A partir de las funciones de distribución obtenidas para cada momento de simulación $\rho_s(x, t) = \hat{M}_s(x)$ obtenemos la diferencia comparativa promedio, de las 100 condiciones iniciales aleatorias de las velocidades, con $\tilde{\rho}_s(x, t) = [\hat{M}_{g_o}(x-0.5S, 500, D, L) + \hat{M}_{g_o}(x+0.5S, 500, D, L)]/2$ utilizando $Diff_s = 1/T \int_0^T dt \int dx \|\rho_s(x, t) - \tilde{\rho}_s(x, t)\|$ como parámetro de mérito, el cual muestra la linealidad del operador \hat{M} . Para $S=500$ se tiene en realidad un único conglomerado de 1000 partículas agrupadas interactuantes cuyo comportamiento se diferencia significativamente con el correspondiente a la situación inicial de simulación. En la medida que S aumenta disminuye la correlación entre las distribuciones de las agrupaciones, este comportamiento se muestra en la figura 3, entre $S=500$ y 800 hay alrededor de 3 órdenes de magnitud de diferencia lo que muestra una tendencia a la linealidad de \hat{M} que puede ser utilizada para subdividir el dominio para realizar estudios posteriores más detallados.

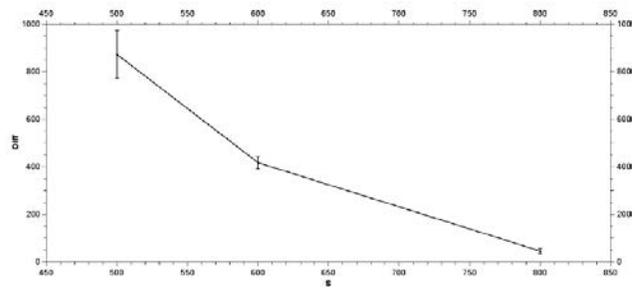


Figure 3. Cuantificación de la diferencia al aplicar el operador de evolución como método para evaluar su linealidad.

CONCLUSIONES

Se obtuvo una aproximación del operador de evolución para un sistema unidimensional con alto confinamiento que reproduce de manera simplificada la difusión de células de glóbulos rojos en capilares. Se estudió el comportamiento promedio de la desviación cuadrática: para valores de tiempo cortos se observa un crecimiento lento que va disminuyendo con el aumento de S , este comportamiento se corresponde con el proceso de estabilización de las interacciones entre las partículas y el fluido; para tiempos intermedios se observa un incremento promedio casi lineal lo que se explica por el proceso de desagrupación de las partículas en el que prevalece la interacción de estas con el fluido provocando una tendencia hacia la difusión normal; para tiempos largos el proceso de difusión se hace más lento como resultado de la homogenización de la distribución de las partículas lo que provoca un aumento de la frecuencia de colisiones entre las partículas, con un aumento de las

correlaciones que desencadenan un comportamiento anómalo. El comportamiento descrito reproduce correctamente el comportamiento general del microfluido sanguíneo con alto grado de confinamiento y es muy similar a lo obtenido en simulaciones bidimensionales [17] y al esperado en el sistema real [4].

AGRADECIMIENTOS

Agradecemos la colaboración con el Centro de Simulaciones Avanzadas del Forchungzentrum Juelich en Alemania y al proyecto institucional de Caracterización Computacional de Sistemas Difusivos de la Universidad de las Ciencias Informáticas que han dado soporte logístico y metodológico para la realización del presente trabajo.

[1] E. K. Lenzi, R. S. Mendes, K. S. Fa, L. C. Malacarne and L. R. da Silva, *Journal of Mathematical Physics* 44, 2179 (2003).
[2] P. Demontis and G. B. Suritti, *Phys Rev E* 74, 051112 (2006).
[3] T. Ambjörnsson, L. Lizana, M. A. Lomholt and R. J. Silbey, *The Journal of Chemical Physics* 129, 185106 (2008).

[4] S. Chien, *Annual Review of Physiology* 49, 177 (1987).
[5] A. Kratz, M. Ferraro, P. M. Sluss and K. B. Lewandrowski, *New England Journal of Medicine* 351, 1548 (2004).
[6] H. Zhao and E. S. G. Shaqfeh, *Phys Rev E* 83, 061924 (2011).
[7] E. Barkai, *Chemical Physics* 284, 13 (2002).
[8] K. S. F. L. C. M. E. K. Lenzi, R. S. Mendes and L. R. da Silva, *J Math Phys* 44, 2179 (2003).
[9] A. M. Gianni Pagnini and F. Mainardi, *International Journal of Stochastic Analysis* 2012, 14 (2012).
[10] M. Marchesi, *Chemical Physics Letters* 97, 224 (1983), ISSN 0009-2614.
[11] F. Stillinger and T. Weber, *Phys Rev B* 31, 5262 (1985).
[12] S. Boinepalli and P. Attard, *J Chem Phys* 119, 12769 (2003).
[13] K. Tucci and R. Kapral, *The Journal of Physical Chemistry B* 109, 21300 (2005). PMID: 16853762.
[14] H. Noguchi, N. Kikuchi and G. Gompper, *EPL (Europhysics Letters)* 78, 10005 (2007).
[15] I. O. Götze, H. Noguchi and G. Gompper, *Phys Rev E* 76, 046705 (2007).
[16] I. Rao and K. Rajagopal, *Acta Mechanica* 135, 113 (1999), ISSN 0001-5970.
[17] J. Sane, J. T. Padding and A. A. Louis, *Faraday Discuss* 144, 285 (2010)

STUDY OF THE *CIS-TRANS* PHOTOISOMERIZATION IN A MODEL POLYATOMIC MOLECULE

ESTUDIO DE LA FOTOISOMERIZACIÓN *CIS-TRANS* EN UNA MOÉCULA POLIATÓMICA MODELO

F. RODRÍGUEZ-HERNÁNDEZ, A. MARTÍNEZ MESA[†], L. URANGA PIÑA

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

[†] corresponding author

PACS: Semiclassical theories in atomic physics, 31.15.xg; Isomerization reactions, 82.30.Qt; Ultrafast processes in femtochemistry, 82.53.-k

Cis-to-trans photoisomerization represents a paradigmatic example of a dynamical process driven by a conical intersection [1] and it plays an important role in several phenomena in physics, chemistry and biology. For example, it is a key step in both photosynthesis and vertebrates vision [2]. Likewise, it is at the heart of the design of novel nanoscale devices such as molecular switches, sensors and motors [3], owing to the distinct macroscopic chemical and physical properties that correspond to each isomer [4].

The intrinsic many-body character of these processes makes numerically converged calculations of the isomerization rates difficult to achieve. Photoisomerization yields are chiefly determined by the nuclear dynamics near conical intersections, thereby ruling out the possibility to carry out a quantum treatment of the molecular dynamics within the Born-Oppenheimer approximation. Fortunately, very often there is a clear separation between the chromophore, which actively responds to photoexcitation, and the rest of the system. This separation enables to apply, to the analysis of photoisomerization, the nowadays available theoretical and computational tools for the accurate study of the quantum dynamics of small molecular systems.

A possible route to undertake the computer simulation of *cis-trans* photoisomerization is the introduction of hybrid quantum-classical integration schemes. Since the quantum character of the isomerization process can not be completely neglected, its numerical investigation relies, at present, on the accuracy of the mixed quasi-classical approaches. As a consequence, new models are continuously developed and tested [5]. Simple models are specially valuable as they provide intuitive representations of reaction mechanisms and they constitute ideal test grounds for new computational approaches. The purpose of the present work is to carry out the study of non-adiabatic *cis-trans* photoisomerization of a prototype polyatomic molecule, within the framework of

quantum-classical molecular dynamics, for a two-state two-mode model previously introduced in the literature [6]. To this aim, the simultaneous resolution of the time-dependent Schrödinger equation, along the active modes of the chromophore, and the canonical equations of motion, for the classical subsystem, are tackled via the symplectic algorithm introduced in Ref. [7]. The availability of previous theoretical results, from quasi-classical and reduced density matrix integration schemes [8], provides an ideal benchmark to assess the performance of this integration scheme in this specific problem. Moreover, the results reported in Ref. [8] are complemented by the analysis of the dynamical state of the bath.

Following Refs. [6, 8-10], we assume that a two-state model involving two nuclear modes is capable to account for the essential aspects of the isomerization process. The model Hamiltonian \hat{H}_s , in the diabatic representation, in terms of the two lowest electronic states, $|\psi_n\rangle$ and $|\psi_m\rangle$, is written as follows:

$$\hat{H}_s = \sum_{n,m=0,1} |\psi_n\rangle (\hat{T} \delta_{nm} + \hat{V}_{nm}) \langle \psi_m | \quad (1)$$

The dependence of the diabatic potential matrix \hat{H}_{SB} and the kinetic energy operator \hat{T} , on the dimensionless (mass-weighted) variables q and φ , has been described elsewhere [6]. The vibrational coordinate q effectively accounts for all the normal modes of oscillation in the chromophore, while the reaction coordinate φ parametrizes the twist of the molecular fragment corresponding to isomerization. It should be noticed that the interval $-\frac{\pi}{2} \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2}$ corresponds to the *cis* configuration while the range $\frac{\pi}{2} \leq \varphi \leq \frac{3\pi}{2}$ corresponds to the *trans* geometry, the value $\varphi = \frac{\pi}{2}$ corresponds with the geometry of the conical intersection. The remaining N degrees of freedom are represented by a bath of harmonic oscillators. The dynamics of the bath oscillators is modeled classically by the Hamiltonian \hat{H}_b , and this classical subsystem is coupled to the chromophore through the

coupling term \hat{H}_{SB} . The explicit expressions and the values of the parameters appearing in the different terms of the total Hamiltonian:

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_B + \hat{H}_{SB} \quad (2)$$

were taken from the literature [8].

The dynamical state of the system evolves according to the coupled set of equations:

$$i \frac{\partial \Psi(q, \varphi, t)}{\partial t} = [\hat{H}_S + \hat{H}_{SB}(\vec{x}(t))] \Psi(q, \varphi, t)$$

$$\dot{\vec{x}} = \frac{\partial H_B}{\partial \vec{p}}$$

$$\dot{\vec{p}} = -\frac{\partial H_B}{\partial \vec{x}} - \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \langle \Psi | \hat{H}_{SB} | \Psi \rangle \quad (3)$$

The vectors \vec{x} and \vec{p} span the full phase space of the harmonic bath. Hereafter, we shall use the atomic units ($\hbar=1$). The symplectic PICKABACK scheme [1] allows to update the states of the quantum and classical subsystems, explicitly taking into account the interaction between them. As in previous studies [7], the discretized thermal bath is built by 200 harmonic oscillators, with homogeneously distributed frequencies in the range $0 < \omega_\alpha < 0.3$ eV. An ensemble of up to $N_{\text{copies}}=5000$ copies for each oscillator were used in the calculation of the observables. The initial conditions of the copies sample the quantum distribution, in position and momentum spaces, corresponding to the ground state of each oscillator.

For the quantum subsystem, we need to solve the coupled time-dependent Schrödinger Eq. (3). In the diabatic representation, the wavefunction reads:

$$\Psi(q, \varphi, t) = \sum_{n=0,1} \phi_n(q, \varphi, t) |\psi_n\rangle \quad (4)$$

Since the laser excitation pulse is assumed to be instantaneous, the initial wavepacket promoted to the excited electronic state is the exact copy of the ground state wavefunction corresponding to the (separable) potential $V_{00}(q, \varphi)$. For the vibrational ground state, the dependence of the initial wavefunction $\phi_0(q, \varphi, t=0)$ on the vibrational coordinate q is known analytically. The dependence of the two-dimensional wavefunction $\phi_0(q, \varphi, t=0)$ on the isomerization angle φ is obtained using a Numerov's finite-difference scheme [12]. The initial wavepacket is evolved in time by introducing a finite-difference representation of the Hamiltonian in a two-dimensional grid. The split-operator technique was used to represent the evolution operator. Both quantum and classical equations of motion were integrated using a time-step of $dt=0.1$ a.u. A total of 2.5×10^6 updates of the molecular state $(\vec{x}, \vec{p}) \Psi(q, \varphi, t)$ were carried out, equivalent to a time interval of about 6 ps after photoexcitation.

In Figure 1, the time evolution of the total energy

corresponding to the bath modes is represented (only the first 3 ps after the initial excitation are shown). The overall behaviour confirms the absorption of the excess energy by the classical subsystem. As it is shown in the figure, there is an initial increase of the bath energy by approximately 0.03 eV taking place during the first 20 fs upon photoexcitation, followed by a slower energy uptake over a period of about 580 fs. The sudden increase of bath's energy by 0.017 eV, happening at 600 fs, is followed by a further rise lasting about 200-300 fs. After 1 ps, the bath have absorbed about 0.4 meV per mode on average. Since the drop in the average energy of the chromophore is governed by the system-bath coupling \hat{H}_{SB} , which is chosen to be position-dependent, its course before and after $t=600$ fs suggests that a marked restructuring of the molecule occurs at this time. From 1 ps onwards, it ceases the net energy drift from the chromophore to the bath. It is replaced by a plateau-like behaviour, where only relatively small fluctuations 5% occur around the asymptotic energy of the bath modes.

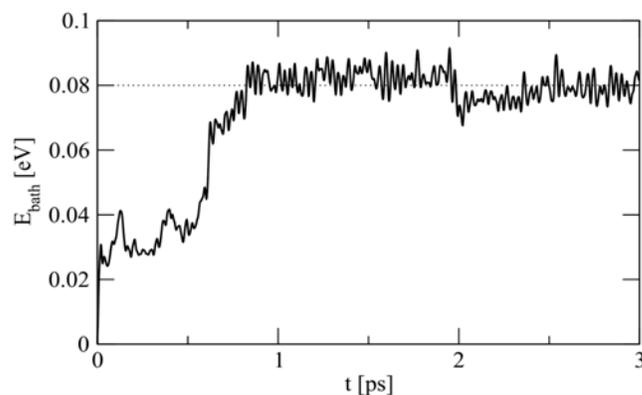


Figure 1. Time evolution of the total energy corresponding to the bath modes.

In Figure 2 it is shown the time-evolving population corresponding to the *cis* geometry (the population of the *trans* isomer mirrors this curve), during the first 3 ps after photoexcitation. The initial value $P_{\text{cis}}(t=0)=1$ follows from the initial conditions for the wavepacket, centred around the potential energy minimum of the *cis* configuration.

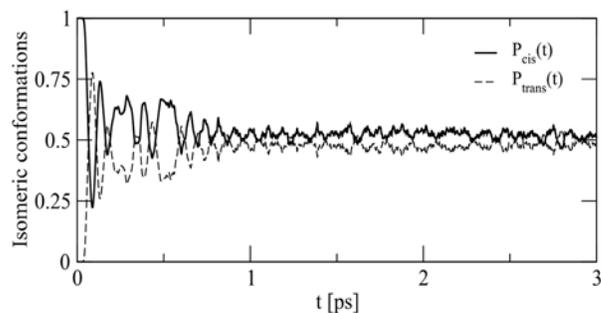


Figure 2. Time-evolving population corresponding to the *cis* and *trans* geometry.

Upon photoexcitation, the geometrical rearrangement of the molecule takes place in two stages. During the first 90 fs, a fast decrease of the probability P_{cis}

occurs. After attaining its minimal value, it begins a gradual recovery of the *cis* population. This increase occurs in a much larger time scale: the *cis* and *trans* populations reach their asymptotic limits in about 1 ps. This early phase is characterized by strong recurrences, which get continuously damped until the equilibrium is reached.

A more microscopical understanding of the time evolution of the molecular rearrangement is provided by the probability distribution $\rho(\varphi, t)$ along the reaction coordinate φ . This probability density is shown in Figure 3 for selected points in time in the interval $0 \leq t \leq 110$ fs. It can be noticed how, during the first 30 fs, the wavefunction describing the displacement in the diabatic state $n=1$ gets progressively broader, under the influence of the V_{11} potential energy surface, while it keeps its nearly Gaussian shape. At $t=30$ fs, the right front of the wavepacket reaches the position of the conical intersection, giving rise to transitions between the electronic states, as it can be seen in the right panel. This moment also marks the beginning of the transfer of population to the *trans* geometry. From 30 fs onwards, there is an increasingly larger fraction of the wavepacket lying in the neighbourhood of the point of degeneracy, thereby strengthening the rate at which electronic transitions take place. After 110 fs, as it is shown in the right panel of Figure 3, as a consequence of these transitions, the diabatic state V_{00} has been repopulated up to a significant extent ($P_0^{\text{diab}} = P_1^{\text{diab}} = 0.5$). The simultaneous population of the two diabatic states is reflected by the further splitting of the nuclear wavepacket into two parts which move away from the conical intersection in opposite directions. Albeit exhibiting a comparatively large probability of being around the conical intersection, the electronic transitions tend to balance beyond 600 fs. Hence, after that moment, the possibility of a net population transfer between the electronic states to occur is largely reduced and the displacement along the isomerization coordinate slows down, leading to the stabilization of the *cis* and *trans* populations presented above. Interestingly, at short times, the diabatic populations shown in Figure 3 agree qualitatively with the previous simulations carried out for the same model, based on Redfield theory [8]. In particular, within the subpicosecond time scale, the quantum-classical methodology employed in this work performs better than the classical mapping formalism introduced in Ref. [8], despite the extent of quantum corrections brought into that model.

In summary, the structural modification of a generic molecular system was investigated, employing a model hamiltonian which describes the chromophore as a quantum system with only two degrees of freedom, while the rest of the generalized molecular coordinates are treated as a set of classical harmonic oscillators. Only the ground and the first excited electronic states are considered to take part in the process. The main features of the mechanism of photoisomerization are explained in terms of the probability density along the isomerization coordinate, i.e., the splitting of

the wavepacket and the electronic transitions induced by non-adiabatic couplings in the vicinity of the degeneracy seam. For this model, the *cis*-to-*trans* reaction yield is found to be about 0.5, while the isomerization process does not occur in a single step. The early time evolutions of the populations of the *cis* and *trans* isomers (and also those of the diabatic electronic states) exhibit rather large recurrences, which reflects the coherent dynamics of the nuclear wavepacket. From the comparison with previous reports on the non-adiabatic dynamics of similar systems, and owing to the universal features of the model employed, it can be concluded that the present quantum-classical simulation strategy is capable to describe the process of *cis*-to-*trans* photoisomerization in a satisfactory manner. The methodology can be readily applied to polyatomic molecular systems interacting with realistic bath models, where the coherent character of the nuclear dynamics or the large number of degrees of freedom involved prevent, respectively, the use of purely classical approaches or more rigorous schemes, like the MCTDH package.

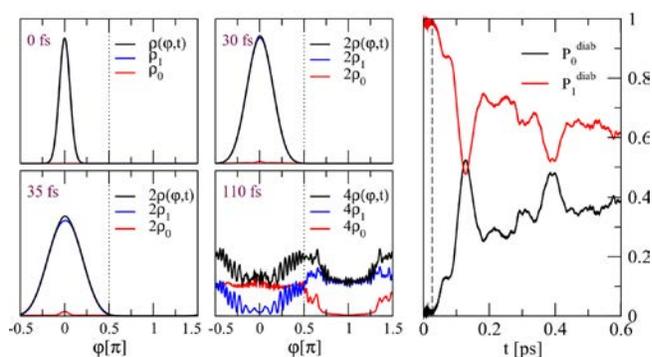


Figure 3. Probability distribution $\rho(\varphi, t)$ along the coordinate φ for some representative instants of time. In the right panel it is shown the time evolution of the diabatic electronic states population.

- [1] F. Bernardi, M. Olivucci, M. A. Robb, *Chem. Soc. Rev.* 25, 321 (1996).
- [2] G. Wald, *Science* 162, 230 (1968).
- [3] A. B. Cubitt, R. Heim, S. R. Adams, A. E. Boyd, L. A. Gross, R. Y. Tsien, *Trends Biochem. Sci.* 20, 448 (1995).
- [4] C. Zhang, M. H. Du, H. P. Cheng, X. G. Zhang, A. E. Roitberg, J. L. Krause, *Phys. Rev. Lett.* 92, 158301 (2004).
- [5] U. Müller, G. Stock, *J. Chem. Phys.* 107, 6230 (1997).
- [6] L. Seidner, W. Domcke, *Chem. Phys.* 186, 27 (1994).
- [7] P. Nettesheim, F.A. Bornemann, B. Schmidt, C. Schütte, *Chem. Phys. Lett.* 256, 581 (1996).
- [8] I. Uspenskiy, B. Strodel, G. Stock, *Chem. Phys.* 329, 109 (2006).
- [9] S. Hahn, G. Stock, *J. Phys. Chem. B* 104, 1146 (2000).
- [10] B. Balzer, G. Stock, *Chem. Phys.* 310, 35 (2005).
- [11] X. Chen, V. S. Batista, *J. Photochem. Photobiol. A: Chem.* 190, 274 (2007).
- [12] G. Delgado-Barrio, A. M. Cortina, A. Varadt, P. Mareca, P. Villarreal, S. Miret-Artes, *J. Comput. Chem.* 7, 208 (1986).

ACERCA DE UN ANÁLOGO TRIDIMENSIONAL DE LA FÓRMULA INTEGRAL DE CAUCHY Y SU APLICACIÓN A LA ELECTROSTÁTICA

ON A TRIDIMENSIONAL ANALOGUE OF CAUCHY INTEGRAL FORMULA AND ITS APPLICATION TO ELECTROSTATICS

R. ÁVILA ÁVILA^{a†}, R. ABREU BLAYA^a Y J. BORY REYES^b

a) Departamento Licenciatura en Matemática, Universidad de Holguín, Cuba; ravilaa@facinf.uho.edu.cu †.

b) Departamento de Matemática, Universidad de Oriente, Cuba.

Palabras clave: Cuaterniones, electrostática, Fórmula Integral de Cauchy

Una de las primeras investigaciones sobre la generalización de los resultados del análisis complejo a dimensiones superiores se debe a los matemáticos rumanos G.C. Moisil y N. Theodorescu [1], pioneros en abordar el tema a partir de un enfoque cuaterniónico.

El desarrollo ulterior de la teoría recibió un impulso en los trabajos de A. B. Bizadze [2, 3] que profundizaron en los análogos del sistema de Cauchy Riemann en el espacio tridimensional euclídeo. La aproximación cuaterniónica permite profundizar en una serie de propiedades de las integrales referidas, de gran utilidad desde el punto de vista teórico y en sus aplicaciones [4].

Los análogos tridimensionales de las integrales de Cauchy en forma vectorial, ofrecen una escritura relativamente cómoda y más familiar en aplicaciones físicas, facilitando su extensión natural a cualquier campo físico vectorial laplaceano. Su deducción a partir operaciones usuales tratadas en el álgebra y el análisis vectorial [5], sugiere una vía general de aplicación para calcular la intensidad de campos en dominios volumétricos acotados por ciertas superficies cerradas suaves.

Es conocido que si Γ es una curva suave en el plano de la variable compleja z , D^+ constituye el dominio encerrado por la curva dada (dominio interior), D^- el dominio complementario o dominio exterior y $F(z)$ es una función analítica en D^+ y continua en $D^+ + \Gamma$, entonces es válida la fórmula integral de Cauchy.

Brackx, Delanghe and Sommen [5] aplicaron ampliamente el enfoque cuaterniónico y su relación con las propiedades de las integrales del tipo Cauchy en un contexto más generalizado y conceptualizado como Análisis de Clifford.

Sea u una función cuaterniónica definida en cierto dominio

$\Omega \in \mathbb{R}^3$ y que toma valores en $H(\mathbb{R})$, tal que ella sólo es función de cuaterniones puramente imaginarios (vectores):

$$u(\underline{x}) = u_o(\underline{x}) + \underline{u}(\underline{x}) \quad (1)$$

Si la función es hiperholomorfa [6], satisface el sistema de Moisil-Theodorescu:

$$\begin{aligned} \underline{\partial}(u(\underline{x})) &= \underline{\partial}(u_o(\underline{x}) + \underline{u}(\underline{x})) = \\ &= -\text{div}(\underline{u}) + \text{grad}(u_o) + \text{rot}(\underline{u}) = 0 \end{aligned} \quad (2)$$

Teniendo en cuenta que las funciones vectoriales usuales constituyen un caso especial de funciones cuaterniónicas y de hecho sus partes escalares son nulas, y reemplazando el operador de Moisil-Theodorescu por el operador nabla habitual $\vec{\nabla}$, aplicando la definición de producto cuaterniónico, el sistema (2) resulta:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \vec{F} = 0 \\ \nabla \times \vec{F} = 0 \end{cases} \quad (3)$$

Las expresiones obtenidas son típicas para aquellos campos vectoriales en \mathbb{R}^3 denominados en una terminología más familiar, campos solenoidales y potenciales (irrotacionales).

Si se denota $q(x)$ como función que satisface (2), tal y como se deduce [3] se obtiene el análogo tridimensional de la Fórmula Integral de Cauchy de la teoría de funciones de una variable compleja en la forma:

$$\frac{1}{4\pi} \iint_s M(x, y) q(y) ds_y = \begin{cases} q(x), & x \in \Omega^+ \\ 0, & x \in \Omega^- \end{cases} \quad (4)$$

Los vectores x , y considerados pertenecen a \mathbb{R}^3 , M es un operador diferencial matricial, Ω^+ cierto dominio acotado por

una superficie suave y Ω el dominio exterior. La fórmula (4) es equivalente a la deducida en [4] y cuyo aspecto es:

$$\frac{1}{4\pi} \iint_S \nabla \frac{1}{|\underline{x} - \underline{x}'|} n \cdot v \, dS = \begin{cases} f(\underline{x}'), & \underline{x}' \in D \\ 0 & \underline{x}' \notin D \end{cases} \quad (5)$$

Las \underline{x} subrayadas representan vectores de \mathbb{R}^3 , D es el dominio Ω^+ de \mathbb{R}^3 y el producto indicado con un asterisco representa el producto cuaterniónico. En el caso de funciones cuaterniónicas monogénicas completamente imaginarias simbolizadas por F (campos vectoriales tridimensionales laplaceanos), la expresión (5) se convierte en la obtenida en [7]:

$$\frac{1}{4\pi} \iint_S \left[\vec{F} \left(\frac{\vec{r}}{r^3} \cdot \vec{n} \right) + \frac{\vec{r}}{r^3} (\vec{F} \cdot \vec{n}) - (\vec{F} \cdot \frac{\vec{r}}{r^3}) \vec{n} \right] dS = \begin{cases} \vec{F}(\vec{r}'), & \vec{r}' \in D \\ 0 & \vec{r}' \notin D \end{cases} \quad (7)$$

Sea un volumen acotado por cierta superficie cerrada suave y relleno con un material dieléctrico con determinado valor de la polarización (se considera nula la densidad volumétrica de carga libre). El campo debido a las cargas de polarización que aparecen en la superficie de separación del dieléctrico y distribuidas con cierta densidad superficial es un campo vectorial laplaceano [7] y satisface la expresión (6). Aplicando además la relación entre las funciones vectoriales desplazamiento eléctrico, la polarización y el campo eléctrico para dieléctricos lineales e isotropos así como las condiciones de frontera que satisfacen las componentes tangenciales del campo eléctrico y las normales del desplazamiento eléctrico, se obtiene la expresión:

$$\vec{E}(P) = -\nabla \phi(P) + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \iint_S (\vec{P} \cdot \vec{n}) \frac{\vec{r}}{r^3} \, dS \quad (7)$$

Así a la intensidad del campo electrostático en el punto P contribuyen la carga de polarización distribuida por todo el volumen del dieléctrico y la carga de polarización distribuida

por toda la superficie que lo separa del medio exterior. Si las cargas de polarización estén ausentes:

$$\vec{E}(P) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \iint_S (\vec{P} \cdot \vec{n}) \frac{\vec{r}}{r^3} \, dS \quad (8)$$

Para los campos vectoriales laplaceanos electrostáticos, se obtiene una fórmula que permite calcular el campo en el interior de un volumen acotado de un dieléctrico por una superficie suave y que refleja el hecho físico asociado a las cargas de polarización como fuente de campo complementario.

[1] G.C. Moisil, N. Theodorescu, Functions holomorphes dans l'espace, Mathematic (cluj), 5, 142-159 (1931).

[2] A.V. Bisadze, Spatial analog of the Cauchy Type Integral and some of its applications. Izvestia Akademii Nauk, SSSR, seria Matematicheskaja, vol. 17, No. 6, 525-538 (1953).

[3] Д.В Бицадзе, Основы Теории Аналитических Функций Комплексного Переменного (Издательство Наука, Москва, 1969).

[4] Н.А Василювский, М.С Жданов, М. В Шапиро, Пространственные аналогии Интеграла Типа Коши и Теории Кватернионов. В Препринт No. 48 (737) Академия Наук СССР, Москва (1987).

[5] F. Brackx, R. Delanghe, F. Sommen, Clifford Analysis (Pitman, London, 1982).

[6] R. Abreu Blaya; J Bory Reyes; M. Shapiro. On the Laplacian vector field theory in domains with rectifiable boundary. Math. Methods Appl. Sci., Vol. 29, No. 15, 1861-1881, (2006).

[7] A. Nicolaide, Three-Dimensional Analog of the Cauchy Integral Formula for Solving Magnetic Fields Problems. IEEE Transactions in magnetic, vol. 34, No. 3, May (1998).

UNA COMPARACIÓN ENTRE LOS RETRASOS DE TIEMPO DE CARÁCTER RELATIVISTA Y TERMODINÁMICO

COMPARISON BETWEEN DELAY OF TIME OF RELATIVISTIC AND THERMODINAMICAL CHARACTER

L. PÉREZ-TAMAYO

Dpto. de Física Química Electrónica Universidad de Holguín. luperta@facing.uho.edu.cu

Palabras clave: black body radiation (44.40.+a), red schiff (98.62.Py), Hawking effects 04.60.-m), black holes evaporation (04.70.Dy)

Luego de las teorías relativistas einsteinianas, la comunidad científica asimiló la idea del carácter relativo del tiempo en sistemas en condiciones de movimiento y campos gravitacionales diferentes, manteniéndose el concepto de que cada sistema tiene un tiempo propio local, invariante ante las transformaciones de coordenadas.

El retraso de tiempo relativista se manifiesta como un corrimiento al rojo de origen doppleriano o gravitacional. Se denomina corrimiento al rojo al desplazamiento hacia las longitudes de onda λ más largas del espectro electromagnético, lo que en realidad constituye un alargamiento de los períodos de tiempo de los ciclos ondulatorios, ya que, como conocemos:

$$\lambda = ct \quad (1)$$

Donde c es la velocidad de la luz y t el tiempo de duración de cada ciclo.

Por otro lado, se conoce que la ley de la radiación del cuerpo negro explica la causa de la distribución de las longitudes de onda emitidas en dependencia de la temperatura, como consecuencia del carácter discreto de la emisión de la luz, en lugar del carácter continuo asignado anteriormente.

La ley de Wien revela una relación entre las longitudes de onda λ_{\max} de los máximos de emisión con la temperatura:

$$\lambda_{\max} = 3 \times 10^{-6} / T(\text{K}) \quad (2)$$

donde λ_{\max} viene dada en m.

O sea, como es conocido, un cuerpo negro cuya temperatura disminuye exhibe también un corrimiento al rojo de las longitudes de onda.

Siguiendo dicho razonamiento, pudiera decirse que con la disminución de la temperatura T , se alarga el tiempo

de los procesos que determinan la emisión de radiación electromagnética, hecho que denominamos retraso termodinámico del tiempo, concepto no encontrado en la literatura revisada.

Sirva como ilustración el hecho de que cuando la temperatura del cuerpo negro disminuye de 10 000 K a 1 K, el retraso termodinámico del tiempo es de cuatro órdenes.

El objetivo central de este trabajo es hacer una comparación entre los tres tipos de retraso temporal aquí considerados: doppleriano, gravitacional y termodinámico.

Con relación a este último, nos referiremos a fenómenos que se caracterizan por experimentar transformaciones con variación continua de la temperatura.

Sea $\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0$ el corrimiento al rojo experimentado por una longitud de onda inicial λ_0 .

Para el caso doppleriano:

$$\Delta\lambda / \lambda_0 = \left[(1 + u/c)(1 - u/c) \right]^{1/2} - 1 \quad (3)$$

Donde u es la velocidad relativa de alejamiento entre un sistema en movimiento y el observador y c la velocidad de la luz.

Para el caso gravitacional:

$$\Delta\lambda / \lambda_0 = GM / c^2 R \quad (4)$$

donde: G constante gravitacional, M , R masa y radio del mega-objeto respectivamente y c velocidad de la luz.

La fórmula anterior puede modificarse a partir de la definición de potencial gravitacional ϕ :

$$\phi = GmM / R \quad (5)$$

donde m es la masa de sondeo en kg y ϕ está dado en J.

Comparando ϕ con el potencial gravitacional del sol ϕ_\bullet , se puede llegar a:

$$\Delta\lambda / \lambda_o = 2 \times 10^{-6} \phi / \phi_\bullet \quad (6)$$

Previa sustitución en la fórmula (5), para el potencial gravitacional del sol:

$$G = 6,67 \times 10^{-11} \text{m}^3 \text{s}^{-2} \text{kg}^{-1},$$

$$M_\bullet = 2,1030 \text{ kg},$$

$$R_\bullet = 7.108 \text{ m}.$$

Para el caso del corrimiento termodinámico al rojo:

$$\Delta\lambda / \lambda_o = T_o / T - 1 \quad (7)$$

donde T_o , T temperaturas inicial y final del proceso bajo estudio. A partir de la relación (1), puede escribirse en general,

$$\Delta\lambda / \lambda_o = \Delta t / t_o \quad (8)$$

donde Δt retraso del tiempo $t(s)$, t_o tiempo base de partida.

Tabla 1: Comparación entre los retrasos temporales y su equivalencia para cada tipo tomando $t_o = 1s$				
$\Delta t (s)$	u/c	ϕ/ϕ_\bullet	T_o/T	Comentario
0.01-0.75	0.01-0.5	10^4 - 10^5	1.1-1.7	velocidades ley de Hubble
0.001	0.002	10^3	1.001	gravitación enanas blancas
0.1	0.2	10^5	1.1	gravitación pulsares
0.1	0.2	10^5	1.4	radio crítico de la masa solar
10	0.98	5×10^6	11	quásares
300	0.9999	7×10^7	300	300K-1K superfluidez y superconductividad)

De las fórmulas (3), (6), (7) y (8) puede llegarse a las igualdades:

$$\Delta\lambda / \lambda_o = \left[(1+u/c)(1-u/c)^{-1} \right]^{1/2} - 1 \quad (9)$$

$$= T_o / T - 1 = 2 \times 10^{-6} \phi / \phi_\bullet$$

que permiten estudiar las relaciones entre las velocidades, temperaturas y potenciales que producen los mismos valores de retrasos temporales.

En la Tabla 1 se presenta una comparación o equivalencia entre los tres tipos de retraso temporal para algunos valores de velocidad u/c , potencial gravitacional ϕ/ϕ_\bullet y de la relación T_o/T .

Como puede apreciarse, potenciales gravitacionales tan grandes como 106 veces el del sol, apenas representan un cambio de temperatura, o sea, $T \approx T_o$. Lo mismo ocurre en el caso de los procesos de formación de las enanas blancas y los pulsares, cuyos potenciales gravitacionales fueron tomados de [1] y con procesos tan catastróficos como la contracción del sol hasta su radio crítico de unos 3 km.

Debe aclararse que en estos casos se ha considerado la simple contracción del sol hacia diferentes estadios, sin tener en cuenta otros tipos de procesos, como los que ocurren en las supernovas.

Dichos corrimientos también se corresponden con velocidades del orden de sólo una décima parte de c .

Corrimientos del orden de $z \approx 10$ (entre los más grandes conocidos), propios de los cuasares equivalen a una disminución del orden de 10 veces la temperatura inicial, pero en este caso responden a velocidades de alejamiento tan grandes como 0.98c, muy cercanas a la de la luz.

Por último, un retraso de tiempo del orden de 300 segundos debe corresponderse con campos gravitacionales tan grandes como casi cien millones de veces el campo gravitacional solar o con velocidades de 0,9999 c .

Lo anterior sería equivalente al enfriamiento de un conductor desde 300 K (temperatura ambiente) hasta 1 K, temperatura del orden de la necesaria para obtener superconductividad a bajas temperaturas.

UNA COMPARACIÓN CON LA TEORÍA DE LOS AGUJEROS NEGROS PRIMORDIALES DE HAWKING

Es conocida la teoría de Hawking acerca de la posible formación de agujeros negros microscópicos en los albores del Big Bang [2]. El proceso descrito por el físico inglés parte de una época en que la temperatura del universo alcanzaba valores de millones de millones de kelvin, cuando los enormes campos gravitacionales pudieron ser la causa de contracciones de diferentes valores de masa a volúmenes de radios microscópicos del orden de las dimensiones de un núcleo o menos. Este es un proceso que comienza con un alto valor de temperatura T_o y culmina con valores de temperatura mucho menores.

Hawking, a partir de un tratamiento cuántico de la gravitación, que se basa en la creación de pares partícula-antipartícula en el vacío físico en las inmediaciones del horizonte de sucesos, deduce que los mencionados agujeros negros deben emitir radiación, siendo ésta mayor cuanto menor sea su masa.

Así Hawking llegó a la ecuación [3]:

$$T = hc^3 / (16pG k_B M) \quad (10)$$

donde h es la constante de Planck, k_B constante de Boltzmann. Después de sustituir los valores conocidos de las constantes queda como resultado final:

$$T = 10^{23} / M \text{ (kg)} \quad (11)$$

con T dado en K .

O sea, a mayor valor de la masa M , menor será la temperatura T .

Por otro lado, en este trabajo, partiendo de la fórmula (9), llegamos a la igualdad:

$$T_o / T - 1 = 2 \times 10^{-6} \phi / \phi \bullet \quad (12)$$

la cual establece la relación entre los potenciales ϕ y cambios de temperaturas de T_o a T que producen los mismos retrasos temporales.

Pero, a partir de la ecuación (11), y de la definición de los campos gravitacionales puede escribirse la relación:

$$\phi / \phi \bullet = MR \bullet / M \bullet R$$

Y se llega a:

$$T_o / T - 1 = 2 \times 10^{-6} MR \bullet / M \bullet R \quad (13)$$

Haciendo $T_o = 10^{12}$ K y considerando además un radio microscópico R de 10^{-16} m, del orden del radio del protón, y sustituyendo numéricamente en (13) los valores de la masa y el radio solar, se llega a la ecuación:

$$T = 1.6 \times 10^{23} / M \text{ (kg)} \quad (14)$$

coincidente con el resultado a que llegó Hawking en (10) por otra vía.

Tal coincidencia sugiere la posible existencia de vínculos físicos entre los diferentes tipos de retraso, más profundos que la simple comparación expuesta en este trabajo.

Los cálculos de Hawking requirieron ciertas aproximaciones cuánticas, como lo exige el tratamiento de un objeto microscópico, mientras que la vía aquí empleada es totalmente clásica.

Debe aclararse que la máxima temperatura que pueda alcanzar un agujero negro en nuestra aproximación está limitada al valor de T_o inicial, en este caso 10^{12} K, ya que la relación T_o/T se hace del orden de la unidad lo que implica un valor de cero en la ecuación (12).

CONCLUSIONES

Se define el concepto de retraso del tiempo termodinámico, considerando que la radiación térmica emitida por un cuerpo negro sufre un alargamiento de los periodos de su espectro óptico al disminuir la temperatura, o sea, un corrimiento al rojo, análogo al doppleriano o el gravitacional.

Una comparación de los retrasos temporales de carácter relativista (doppleriano y gravitacional) y termodinámico lleva a una relación sencilla entre los cambios de temperatura, la velocidad de un sistema y el campo gravitacional que son capaces de producir similares retrasos temporales.

Aplicando esta idea al caso de los agujeros primordiales de Hawking, se reproduce una importante relación entre la temperatura y la masa, similar a la obtenida por el físico británico a partir de aproximaciones cuánticas.

La limitación que presenta nuestra relación con respecto a la de Hawking, no resta valor a la justeza y novedad del enfoque aquí propuesto.

[1] Shklovski, I. S. Estrellas, su nacimiento, vida y muerte. Edit. "Nauka" Moscú 1984. Pp.317-333.

[2] Hawking, S. Historia del tiempo. Edit. Crítica, Barcelona, 1988.

[3] Fernández Cristóbal J. M. Radiación de Hawking. Revista Mexicana de Física. E 56(2) Dic. 2010. 213-216.

INSTALACIÓN AUTOMATIZADA PARA MEDIR LAS CARACTERÍSTICAS DEL LAZO DE HISTÉRESIS EN MATERIALES FERROELÉCTRICOS

AUTOMATIZED INSTALLATION FOR THE MEASUREMENT OF THE HYSTERESIS LOOP IN FERROELECTRIC MATERIALS

D. RIVERO-RAMÍREZ^{a†}, J. PORTELLAS-RODRÍGUEZ^b, A. RIVERO-BALCEIRO^a, TRAN DUC-BAC^b, M. DÍAZ-CASTRO^a, J. SIQUEIROS-BE;TRONES^c, F. J. QUILLES-LATORRE^d Y J. I. BENAVIDEZ-BENÍTEZ^d

a) Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas, Cuba, doris@institec.cu,

b) Facultad de Física, Universidad de la Habana, Cuba, portell@ff.uh.cu

c) Centro de Nanociencias y Nanotecnología, UNAM, Ensenada, México

d) Escuela Politécnica Superior. Universidad de Córdoba, España

† autor para la correspondencia

Palabras clave. Histéresis ferroeléctrica 77.80.Dj, materiales ferroeléctricos, 77.84.Lf, Data acquisition, 07.05.Hd

La ferroelectricidad fue descubierta en 1922 por el científico Francés Joseph Valasek en la sal de Rochelle ($\text{KNa}(\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_6) \cdot 4\text{H}_2\text{O}$) [1], más adelante se encuentra en otros materiales como el Titanato de Bario (BaTiO_3) en 1944 y el Zirconato Titanato de Plomo ($\text{Pb}(\text{Zr,Ti})\text{O}_3$), entre otros muchos [2]. Una de las características más importante de los materiales ferroeléctricos es el lazo de histéresis, que no es nada más que la variación de la polarización (P) con el campo eléctrico externo aplicado (E) [3]. Para la medición del lazo de histéresis generalmente se utiliza el circuito Sawyer y Tower (S-T) por su sencillez y bajo costo [4].

En los materiales ferroeléctricos, además de la corriente de conmutación ferroeléctrica existen otras corrientes indeseables, las cuales producen una deformación de los lazos de histéresis, provocadas por la existencia de una capacitancia lineal (C) y una resistividad (R) en la muestra del material, lo que provoca entre otros el efecto de que el extremo del lazo de histéresis sea redondeado. A través del tiempo se han realizado varias modificaciones y perfeccionado el circuito S-T y para obtener el lazo de histéresis verdadero compensado de estas corrientes no ferroeléctricas [5-11].

Se desarrolló una instalación para realizar las mediciones de los lazos de histéresis en materiales ferroeléctricos y utilizando un método simple poder obtener el lazo de histéresis verdadero, es decir compensando las corrientes no producidas por conmutaciones ferroeléctricas. La instalación permite además medir el envejecimiento y la fatiga de las muestras. Estas son nuevas facilidades que ofrece la instalación en comparación con la desarrollada anteriormente [11]. La instalación reporta los valores de la polarización remanente ($\pm\text{Pr}$) y el campo coercitivo ($\pm\text{Ec}$) al finalizar la medición de cada lazo y los

valores de R y C cuando se hace la compensación de estos, así como los errores en las mediciones, lo cual permite al usuario desecharlas si estos son significativos, es decir son mayores a al 10% para Ec y el 5% para Pr.

Para conformar la instalación se usó un sistema de adquisición de datos (SAD) NI USB 6009 de National Instrument, que se conecta entre una computadora personal (PC) a través de un puerto USB, sustituyendo al de Avantech usado en las instalaciones anteriores [8 y 12] y un generador de señales y amplificador de alto voltaje, desarrollado con anterioridad [12], usando un circuito multiplexor para ampliar los canales de entrada salida digital del SAD usado en esta instalación. También se incluye un circuito de protección, encargado de desconectar el alto voltaje cuando ocurre una ruptura de la muestra y surge un corto circuito entre sus electrodos, con el peligro de que este voltaje llegue al SAD [11], vea la Figura 1.

El generador de señales se desarrolló usando una CPLD (Complex Programmable Logic Device o Dispositivo Lógico Programable Complejo) de Lattice Semiconductor, la ispLSI1032E, para implementar el controlador del circuito del generador, así como la interfaz con el SAD. El resto del circuito del generador lo conforman, una memoria EPROM, para almacenar las formas de onda a generar y finalmente dos conversores digital analógicos (CDA), uno genera la forma de onda y el otro, el valor de la amplitud de la señal.

El amplificador de alto voltaje está conformado por un amplificador de potencia de audio integrado, al cual se acopla un arreglo de transformadores comerciales de subida, con el objetivo de elevar el voltaje a la salida del amplificador de potencia. Se ha utilizado el amplificador de audio LM3876 de National Semiconductor. El arreglo de transformadores

está conformado por la conexión de cinco transformadores de subida comerciales, uniendo sus primarios en paralelo a la salida del amplificador de audio y los secundarios en serie para elevar el voltaje de salida del amplificador y obtener altos voltajes de alterna de hasta 2500 Voltios de amplitud [12].

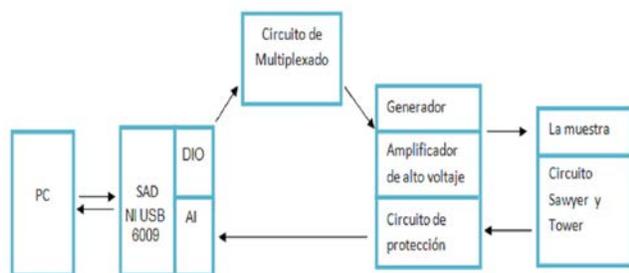


Figura 1. Esquema en bloques de la instalación.

Del circuito Sawyer y Tower se obtiene la señal de respuesta de la muestra a la señal aplicada a esta desde el generador y amplificador de alto voltaje y a través del circuito de protección se introduce en el SAD.

El circuito de protección consiste en un amplificador para la señal proveniente de la muestra, conformado por un amplificador operacional con alta impedancia de entrada, protegido para sobrevoltaje y un LED que indica si hubo saturación del amplificador. La sección de desconexión del alto voltaje consiste en un comparador de doble polaridad, que vela si la señal sobrepasa el nivel de +/- 10V e inmediatamente emitir una señal lógica para desconectar el amplificador de alto voltaje con ayuda de un relé de estado sólido (SSR). El propio circuito permite la reconexión automática del amplificador a través de una señal lógica que se envía desde la PC, luego de que la muestra averiada ha sido previamente sustituida y se desea efectuar otra medición.

instalación, adquirir, procesar y mostrar los datos medidos cuando se le aplica una señal a la muestra y cuenta con una serie de controles en la columna izquierda para introducir los parámetros principales de la muestra a medir, así como para escoger los parámetros de la señal que se le va a aplicar a la muestra. Al final de esta columna cuenta con un control a través del cual se escoge el lugar y nombre del fichero donde se guardarán los resultados de las mediciones y los botones o teclas para ejecutar la medición seleccionada una vez escogidos los parámetros o para salir del programa.

En la columna de la derecha el panel tiene una serie de controles e indicadores para escoger el tipo de medición a realizar, (histéresis, histéresis con compensación, fatiga y envejecimiento), las características de esta y los valores de parámetros intermedios y finales calculados durante las mediciones. Es de destacar que se las mediciones de fatiga, envejecimiento e histéresis con compensación son nuevas en esta versión del programa.

En la zona central del panel se muestra, con ayuda de varias pestañas, diferentes gráficos resultantes de las mediciones efectuadas, entre ellos el lazo de histéresis, las señales aplicada y resultante, entre otras. Mención especial requiere las pestañas "Compensar señal" y "Múltiples Lazos" en que no solo muestra los lazos compensados y sin compensar o múltiples lazos medidos con anterioridad sino que permite introducir algunos parámetros adicionales necesarios para realizar estas dos tareas, así como las pestañas ambas nuevas en esta versión del programa para esta nueva instalación.

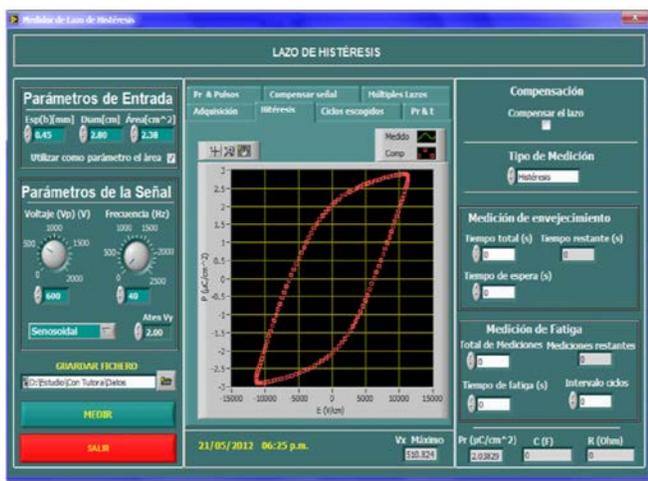


Figura 2. Panel frontal del programa

El programa, totalmente nuevo para esta instalación, se programó usando LabVIEW 8.6, configurando un instrumento virtual (VI), cuyo panel principal se muestra en la Figura 2, y tiene la función de controlar el SAD y todo el resto de la

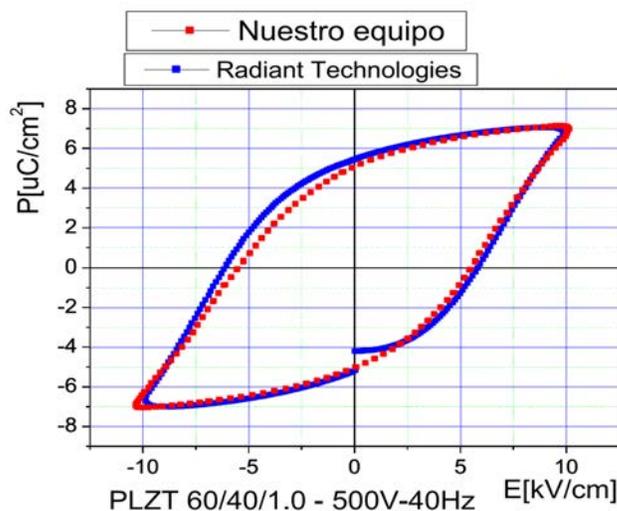


Figura 3. Comparación de una muestra PLZT medida con nuestra instalación y con el equipo de Radiant Technologies.

Se han caracterizado varias muestras de cerámicas ferroeléctricas con esta instalación, y a la vez hemos comparado las mediciones realizadas, con mediciones hechas en las mismas muestras en un equipo comercial de procedencia norteamericana. A continuación, en la Figuras 3 se muestra en un mismo gráfico el lazo de histéresis de una muestra de PLZT medidos en nuestra instalación y la de Radiant Technology

aplicándole una señal de la misma frecuencia. Puede observarse como ambos lazos se solapan y como las diferencias de los valores de P_r es de menos de $0,5\mu\text{C}/\text{cm}^2$ y los de E_c menores de $1\text{kV}/\text{cm}$, a pesar de que el equipo de Radiant no usa el método del circuito Sawyer y Tower y de que los porta-muestras, y formas de las señales difieren en ambas instalaciones.

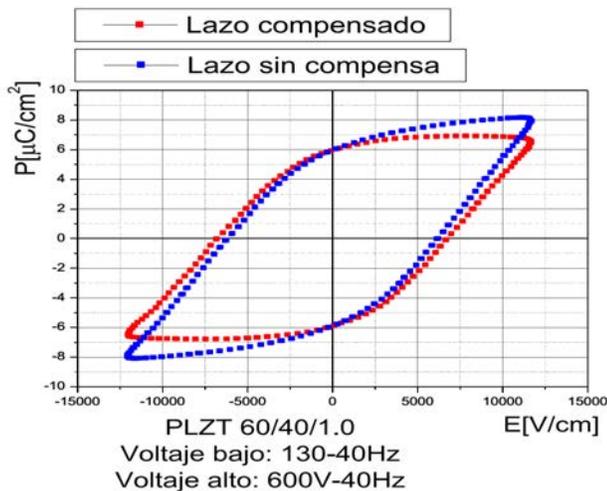


Figura 4. Comparación de un lazo de histéresis con y sin la compensación de la muestra.

En la Figura 4, se muestran los lazos de una muestra de PLZT medidos sin compensación y luego de ser compensado usando el método propuesto en este trabajo. Puede observarse

la horizontalidad del lazo compensado en sus extremos verticales, muestra de la saturación de la polarización, algo que no se observa en el lazo sin compensar.

[1] J. Valasek, *Physical Review* 19, 478 (1922).
 [2] Y. Xu: *Ferroelectric Materials and Their Applications* Elsevier Science Publishers B.V., The Netherlands, pp 16-17, (1991).
 [3] B. Jaffe, W. R. Cook Jr and H. Jaffe, *Piezoelectric Ceramics*, Academic press London and New York, pp 36-46 (1971).
 [4] C.B. Sawyer and C.H. Tower, *Phys. Rev.* 35, 269, (1930).
 [5] H. Diamant, K. Drenck, and R. Pepinsky, *Rev. Sci. Instrum.* 28, 30 (1957).
 [6] H. Roetschi, *J. Sci. Instrum.* 39, 152 (1962).
 [7] J. K. Sinha, *J. Sci. Instrum.* 42, 696 (1965).
 [8] A. M. Glazer, P. Groves, and D.T. Smith, *J. Phys. E: Sci. Instrum.* 17, 95 (1984).
 [9] E. D. Dias, R. Pragasam, V. R. K. Murthy, and B. Viswanathan, *Rev. Sci. Instrum.* 65(9), 3025 (1994).
 [10] S. C. Das, A. Majumdar, A. Shahee, N. P. Lalla, t. Shripathi, and R. Hippler, *Ferroelectrics Letters* 38 (2011) 78.
 [11] D. Rivero, J. Portelles, J.I. Benavides, M. Hernández, F. J. Quiles, M. Díaz. *Rev. Cub. Física* 25 (2B), 133 (2008).
 [12] D. Rivero Ramírez, F. J. Quiles Latorre, J. Portelles Rodríguez, J. I. Benavides Benitez, M. Diaz Castro. *Revista de Ingeniería Electrónica, Automática y Comunicaciones. Revistas Científicas Editorial CUJAE.* Vol. XXXI, No 3 (2010).

EVALUACIÓN DE LA CONFORMIDAD DEL APARATO DE VICAT

CONFORMITY ASSESSMENT OF THE VICAT APPARATUS

F. BUZÓN^{a†} Y A. HERNÁNDEZ^{a†}

a) Instituto Nacional de Investigaciones en Metrología, Cuba; franb@inimet.cu, alehl@inimet.cu.

† autor para la correspondencia.

Palabras clave: metrology 06.20.-f; laboratory procedures 06.60.-c; measurement of mass 06.30.Dr; length measurements 06.30.Bp; materials testing and analysis 81.70.-q

INTRODUCCIÓN

Los aparatos de Vicat son utilizados por el Ministerio de la Construcción, en los laboratorios de ensayo, para la determinación de indicadores de calidad del cemento hidráulico, como el tiempo de fraguado y la consistencia normal. Cuando se construyen estructuras de hormigón, es importante determinar correctamente esos indicadores.

En Cuba está vigente la Norma NC-524:2007 [1] para la determinación de la consistencia normal y tiempo de fraguado por aguja Vicat, que establece los siguientes requisitos técnicos para los aparatos de Vicat:

Deberán consistir de un soporte A (Figura 1) para la barra móvil B, con un extremo C sumergible, y una aguja removible D en el otro; un anillo cónico rígido G, que descansa en el plato de base H, plano, cuadrado y no absorbente. Se recomienda que si el plato es de base circular, tenga como mínimo 100 mm de diámetro. La escala graduada, no deberá tener un error mayor que 0,25 mm cuando es comparada con una escala patrón, con una exactitud de 0,1 mm en todo el intervalo.

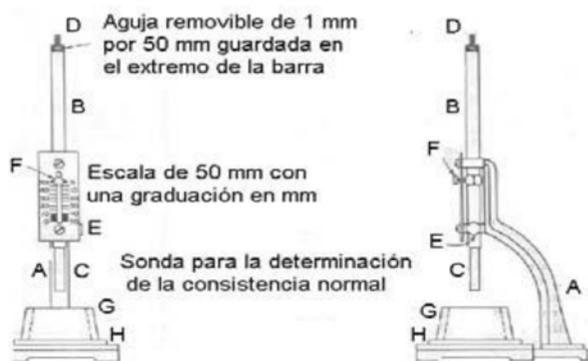


Figura 1. Aparato de Vicat dispuesto para la determinación de la consistencia normal

Además, deberá cumplir lo siguiente:

- Peso de la barra móvil: $(300,0 \pm 0,5)$ g.
- Diámetro del extremo sumergible de la barra: $(10,00 \pm 0,05)$ mm.
- Diámetro de la aguja D: $(1,00 \pm 0,05)$ mm.
- Longitud de la aguja D: 50 mm.
- Longitud de extremo C: al menos 50 mm.
- Diámetro interior del anillo G en la base: (70 ± 3) mm.
- Diámetro interior del anillo G en la circunferencia superior: (60 ± 3) mm.
- Altura del anillo G: (40 ± 1) mm.
- Longitud de plato H: al menos 100 mm.

La evaluación de la conformidad de los aparatos de Vicat se realiza en condiciones ambientales de referencia normales para los laboratorios de ensayo y calibración. Después de evaluar su aspecto exterior y funcionamiento, se determinan la masa de la barra móvil, los diámetros y las longitudes del extremo sumergible de la barra y de la aguja, la altura y los diámetros interiores superior e inferior del anillo, las dimensiones de la base circular o cuadrada, y el error de la medida con trazos en todo el intervalo [2].

Para satisfacer los requisitos de exactitud en todas las pruebas a los aparatos de Vicat, se emplean instrumentos de medición patrones con las siguientes características metroológicas:

- Comparador electrónico de masa, con valor de división de 0,001 g.
- Micrómetro de exterior de (0 a 25) mm, con valor de división 0,01 mm.
- Pie de rey universal de (0 a 200) mm, con valor de división 0,05 mm.

- Microscopio de lectura de 10X, con valor de división 0,05 mm.

ESTIMACIÓN DE LA INCERTIDUMBRE DE LAS MEDICIONES

La incertidumbre expandida de medición se expresa como la incertidumbre combinada de medición multiplicada por el factor de cobertura $k = 2$, la que para una distribución normal corresponde a un nivel de confianza del 95 %.

Entre la componente asociada a las observaciones repetidas y la resolución, se toma la mayor, y la otra se hace cero.

A continuación se muestran las tablas de presupuestos de incertidumbre:

Tabla I
Presupuesto de incertidumbre de la medición de la masa de la barra móvil para $m_m=300,089$ g

Nombre de la componente		Ecuación	Coef. de corr.	u (mg)
U_{rep}	Observaciones repetidas	$\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (B_i - \bar{B})^2}{n(n-1)}}$	0	0,27
U_{ba}	Balanza	$\sqrt{u_{res}^2 + u_E^2 + u_f^2}$	0	0,70
U_{res}	Resolución	$\frac{R}{2\sqrt{3}} \cdot f$	0	0,29
U_E	Excentricidad	$\frac{Exc}{10\sqrt{3}} \cdot f$	0	0,12
u_f	Factor de escala	$\left(\frac{\bar{B} \cdot U_f}{k}\right)$	0	0,63
u_c	Incertidumbre combinada			0,75
U	Incertidumbre expandida			1,5

Tabla II
Presupuesto de incertidumbre de la medición del diámetro del extremo sumergible para $\bar{D} = 10,03$ mm

Nombre de la componente		Ecuación	Coef. de corr.	u (μ m)
U_{res}	Resolución	$\left(\frac{R}{2\sqrt{3}}\right)$	0	2,9
U_{rep}	Observaciones repetidas	$t_s \cdot \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (D_i - \bar{D})^2}{n(n-1)}}$	0	5,2

U_{ei}	Error de indicación	$\frac{EMP_{ei}}{\sqrt{3}}$	0	2,9
$U_{par.pu}$ <small>nt.</small>	Paralelismo	$\frac{EMP_{par.punt.}}{2}$	0	1,0
$U_{planic.}$ <small>punt.</small>	Planicidad	$\frac{\sqrt{2} \cdot EMP_{planic.punt.}}{2}$	0	1,4
U_{v0}	Variación del punto cero	$\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (V_i - \bar{V})^2}{n(n-1)}}$	0	0,18
U_{par}	Paralaje	$\left(\frac{R_D \cdot DO \cdot h}{\sqrt{3} \cdot \pi \cdot \theta \cdot DF}\right)$	0	0,59
U_{tr}	Temperatura	$\frac{0,1D \propto \Delta T_{20}}{\sqrt{2}}$	0	0,024
U_{tpm}	Diferencia de temperatura	$\frac{D \propto \Delta T}{\sqrt{2}}$	0	0,081
U_c	Incertidumbre combinada			6,2
U	Incertidumbre expandida			12

Tabla III
Presupuesto de incertidumbre de la medición de la longitud de la aguja para $\bar{L}_t - \bar{L}_c = 49,11$ mm.

Nombre de la componente		Ecuación	Coef. de corr.	u (μ m)
U_{Lt}	Longitud total	$\sqrt{(u_{res})^2 + (u_{repLt})^2 + (u_{ei})^2 + (u_{par})^2 + (u_{tr})^2 + (u_{tpm})^2 + (u_{Abbe})^2}$	0	33
U_{res}	Resolución	$\left(\frac{R}{2\sqrt{3}}\right)$	0	14
U_{repLt}	Observaciones repetidas	$t_s \cdot \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (L_{ti} - \bar{L}_t)^2}{n(n-1)}}$	0	0
U_{ei}	Error de indicación	$\frac{EMP_{ei}}{\sqrt{3}}$	0	29

U_{par}	Paralaje	$\frac{DO \cdot a \cdot DM}{DF \cdot ev \cdot \sqrt{3}}$	0	0,49
U_{tr}	Temperatura	$\frac{0,1 L_{c_{nom}} \times \Delta T_{20}}{\sqrt{2}}$	0	0,19
U_{tpm}	Diferencia de temperatura	$\frac{L_{c_{nom}} \times \Delta T}{\sqrt{2}}$	0	0,64
U_{Abbe}	Error de Abbe	$\frac{h \cdot a}{l\sqrt{3}}$	0	5,1
U_{Lc}	Longitud del casquillo	$\sqrt{(u_{res})^2 + (u_{replc})^2 + (u_{ei})^2 + (u_{par})^2 + (u_{tr})^2 + (u_{tpm})^2 + (u_{Abbe})^2}$	0	36

U_{res}	Resolución	$\left(\frac{R}{2\sqrt{3}}\right)$	0	14
U_{replc}	Observaciones repetidas	$t_s \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (L_{c_i} - \bar{L}_c)^2}{n(n-1)}}$	0	21
U_{ei}	Error de indicación	$\frac{EMP_{ei}}{\sqrt{3}}$	0	29
U_{par}	Paralaje	$\frac{DO \cdot e \cdot DM}{DF \cdot ev \cdot \sqrt{3}}$	0	0,49
U_{tr}	Temperatura	$\frac{0,1 L_{c_{nom}} \times \Delta T_{20}}{\sqrt{2}}$	0	0,072
U_{tpm}	Diferencia de temperatura	$\frac{L_{c_{nom}} \times \Delta T}{\sqrt{2}}$	0	0,24
U_{Abbe}	Error de Abbe	$\frac{h \cdot a}{l\sqrt{3}}$	0	5,1
U_c	Incertidumbre combinada			49
U	Incertidumbre expandida			98

Para una explicación más detallada sobre las componentes de incertidumbre, ver [2].

La ecuación 1 muestra los componentes de la incertidumbre típica combinada de la medición de los diámetros, alturas y longitudes, si se sustituye D_i por las alturas medidas A_i o las longitudes medidas L_i .

$$u_d = \sqrt{u_{res}^2 + u_{rep}^2 + u_{par}^2 + u_{tr}^2 + u_{tpm}^2 + u_{Abbe}^2} \quad (1)$$

Es importante no contabilizar dos veces la incertidumbre por definición del mensurando, definida como la incertidumbre inherente a una especificación cuando es aplicada a una pieza real [3], como es el caso de la variación del diámetro del extremo sumergible y las variaciones en la longitud del plato de vidrio. Si una componente de incertidumbre procedente de un efecto particular se obtiene mediante una evaluación Tipo B, no debe introducirse como componente independiente en el cálculo de la incertidumbre típica combinada del resultado de medida, salvo, si acaso, la parte de efecto que no contribuye a la variabilidad de las observaciones, porque ya está incluida en la componente de incertidumbre obtenida mediante análisis estadístico (Tipo A) [4].

Tabla IV
Presupuesto de incertidumbre de la medición de la distancia entre los trazos
Dist = 0,90 mm

Nombre de la componente		Ecuación	Coef. de corr.	u (μm)
U_{res}	Resolución	$\left(\frac{R}{2\sqrt{3}}\right)$	0	14
u_{ei}	Error de indicación	$\frac{EMP_{ei}}{\sqrt{3}}$	0	12
u_{tr}	Temperatura	$\frac{Dist_{nom}(\alpha \Delta T_{20})}{\sqrt{2}}$	0	0,024
u_c	Incertidumbre combinada			18
U	Incertidumbre expandida			37

EVALUACIÓN DE CONFORMIDAD

Según la JCGM 106:2012 [5], en una evaluación de conformidad la incertidumbre de la medición debe ser considerada y juzgada como aceptable según el propósito que se desee. Una consideración es que la incertidumbre expandida U_c , para un factor de cobertura $k = 2$, debe satisfacer:

$$U \leq U_{max} = \frac{E_{max}}{3} \quad (2)$$

Donde E_{max} es la tolerancia del valor de referencia y U_{max} es la máxima incertidumbre expandida aceptable [5].

Como se muestra en la Figura 2, las incertidumbres de las mediciones realizadas satisfacen este requerimiento.

La no conformidad o el rechazo pueden ser probados con un nivel de confianza de al menos 97,5 %, cuando el resultado de la medición cae fuera de una banda de resguardo, equivalente a la zona de tolerancia de la característica medida, incrementada

en ambos lados por la incertidumbre expandida U [6].

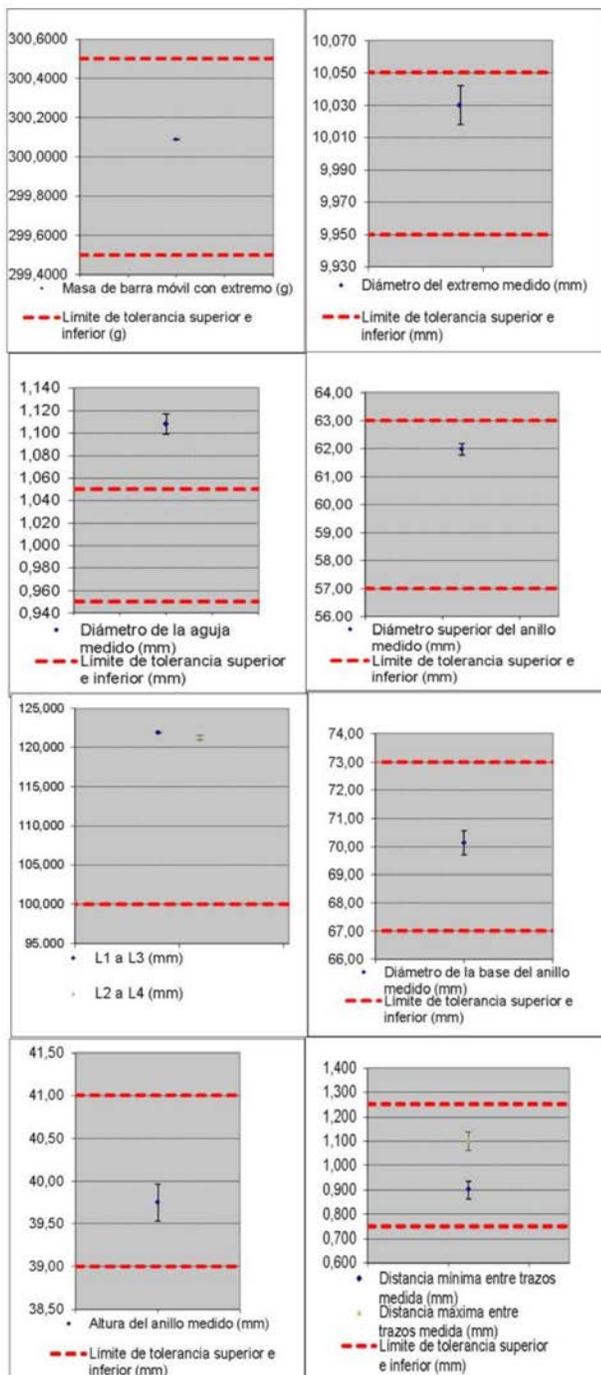


Figura 2. Resultados de las mediciones con sus incertidumbres expandidas, respecto a sus tolerancias.

Cuando existe un solo límite de tolerancia, el intervalo de aceptación quedaría como se observa en la Figura 3. En caso de dos límites: Figura 4.

Debe quedar claro que no se utiliza el muestreo de aparatos de Vicat de un lote determinado, pues cuando las conclusiones

deben ser sobre el lote en general, los efectos primarios de muestreo se vuelven importantes y, con frecuencia, mucho más grandes que la incertidumbre asociada a la medición de un solo instrumento traído al laboratorio.

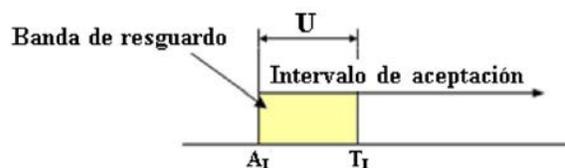


Figura 3. Un límite de aceptación inferior A_I fuera de un límite de tolerancia T_I define un intervalo de aceptación.

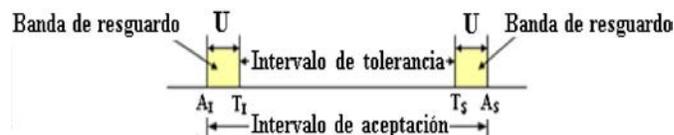


Figura 4. Dos límites de aceptación fuera de los límites de tolerancia definen un intervalo de aceptación.

DISCUSIÓN Y CONCLUSIONES

Se realizaron 690 mediciones de los componentes del aparato de Vicat, en los Laboratorios de Dimensionales y de Masa del INIMET, y las incertidumbres expandidas de medición fueron apropiadas para una evaluación de conformidad, excepto para el diámetro de una aguja.

Se fundamenta el establecimiento de un programa de pruebas para la evaluación de la conformidad de los componentes de los aparatos de Vicat en uso.

[1] NC- 524: 2007 "Cemento hidráulico-Método de ensayo-Determinación de la consistencia normal y tiempo de fraguado por aguja Vicat".

[2] F. Buzón, A. Hernández, Determinación de las características técnicas y metrológicas del Aparato de Vicat (2013), Boletín Científico Técnico del INIMET, ISSN versión impresa: 0138-857, ISSN versión electrónica: 2070-8508.

[3] ISO/TS 17450-2:2002(E) "Geometrical Product Specifications (GPS) – General concepts-Part 2: "Basic tenets, specifications, operators and uncertainties".

[4] JCGM 100:2008 "Evaluation of measurement data. Guide to the expression of uncertainty in measurement".

[5] JCGM 106:2012 "Evaluation of measurement data – The role of measurement uncertainty in conformity assessment".

[6] EURACHEM / CITAC Guide – 1st edition 2007 Use of Uncertainty Information in Compliance Assessment.

EVOLUCIÓN DEL PROCESO DE FOTOSÍNTESIS DESPUÉS DEL IMPACTO DEL ASTEROIDE DE CHICXULUB.

PHOTOSYNETIC PROCESS EVOLUTION AFTER THE IMPACT OF THE CHICXULUB ASTEROID

N. PÉREZ-DÍAZ^{at}, O. MARTÍN-GONZÁLEZ^a Y R. CÁRDENAS-ORTIZ^a

a) Grupo de Ciencia Planetaria, Departamento de Física, Facultad Matemática Física y Computación, Universidad Central "Marta Abreu" de las Villas. noelpd@uclv.edu.cu†

† autor para la correspondencia.

Palabras clave: Aerosols, 92.30.Ef; Asteroids, 96.30.Ys; Impact phenomena, 96.12.ke; Photosynthesis, 92.20.ch; Ultraviolet Radiation; 87.50.W-

El impacto del asteroide de Chicxulub (Yucatán, México), ocurrido hace unos 65 millones de años cerca del límite Cretácico-Paleógeno (K/Pg), ocasionó un brusco cambio climático global y con ello una extinción masiva de vida [1]. La energía cinética del asteroide al impactar, del orden de $10^{24} - 10^{25}$ J, provocó terremotos de categoría 10 en toda la cuenca del Caribe y tsunamis cuyas huellas se aprecian incluso en nuestro país. La evaporación de la roca blanca y la del asteroide inyectó en la estratosfera media y alta gran cantidad de gases del azufre que fueron convertidos en aerosoles del azufre por oxidación. Los mismos redujeron la energía solar que llegaba a la superficie terrestre, conduciendo a un escenario conocido como de "frío y oscuridad". Además, se formaron cantidades enormes de óxidos de nitrógeno y cloro, catalizando la destrucción del ozono atmosférico [2]. Para el impacto de Chicxulub se estimó la inyección de una cantidad de cloro suficiente como para destruir el 80% de la capa de ozono [3]. La destrucción del ozono estratosférico permite el incremento de la radiación ultravioleta (UV) en la superficie terrestre, fundamentalmente del UV-B (280-315 nm), nociva para los organismos vivos. A un incremento de la radiación ultravioleta por la disminución del ozono se opone una reducción por los aerosoles. Mientras los aerosoles ensanchan la absorción de la radiación UV en la estratosfera, la reducción del ozono la disminuye. Estas perturbaciones atmosféricas influyeron notablemente en la evolución del proceso de fotosíntesis después del impacto, atendiendo fundamentalmente a la dinámica de los aerosoles y el ozono.

En este trabajo mostramos la evolución de la atmósfera posterior al impacto de Chicxulub, y como la fotosíntesis del fitoplancton fue afectada. Nuestra atmósfera modelo considera la presencia de aerosoles de azufre y una capa de ozono reducida. Los aerosoles del azufre presentes tienen un 80% de SO_2 y 20% de SO_3 [4]. El contenido de ambos; en distintos

momentos después del impacto, cambia en la medida que se recupera la atmósfera [5]. Se usó una clasificación óptica de las aguas oceánicas para modelar el transporte radiativo oceánico y el consecuente efecto sobre el fitoplancton [6,7].

El estimado del flujo UV en la superficie del mar para diferentes ángulos zenitales, se llevó a cabo usando el software TUV Radiative Transfer Model, que permite cambiar diversos parámetros de la atmósfera bajo estudio.

Las irradiancias espectrales $E(\lambda, z)$ a la profundidad z en la columna de agua oceánica fueron estimadas usando la ley de Lambert-Beer:

$$E(\lambda, z) = E(\lambda, 0^-) \cdot \exp[-K(\lambda) \cdot z] \quad (1)$$

$K(\lambda)$ es el coeficiente de atenuación, $E(\lambda, 0^-)$ es la irradiancia espectral inmediatamente debajo de la superficie del mar calculada sustrayendo la irradiancia reflejada de la incidente $E(\lambda, 0^+)$.

$$E(\lambda, 0^-) = [1 - R] \cdot E(\lambda, 0^+) \quad (2)$$

Siendo R el coeficiente de reflexión estimado con las fórmulas de Fresnel aplicadas a la interfase aire-agua.

La irradiancia total EPAR (λ, z) a la profundidad z en el océano para la radiación fotosintéticamente activa (PAR) es estimada por la expresión Esiguiente:

$$E_{PAR}(z) = \sum_{\lambda_i}^{\lambda_f} E(\lambda) \cdot \Delta\lambda \quad (3)$$

Con $\lambda_i=400$ nm y $\lambda_f=700$ nm los extremos de la PAR y $\Delta\lambda$ es el tamaño del intervalo de longitudes de onda para la cual $K(\lambda)$ es medido. En nuestro caso $\Delta\lambda=1$ nm, [8].

Para el caso de la irradiancia UV inhibitoria fue estimada considerando el espectro de acción biológica $\epsilon(\lambda)$ el cual pesa el efecto de cada longitud de onda de esta banda.

$$E_{UV}^*(z) = \sum_{\lambda_i}^{\lambda_f} E(\lambda, z) \cdot \Delta\lambda \quad (4)$$

Donde el término de la izquierda es la irradiancia biológicamente efectiva que considera el espectro de acción biológica.

Finalmente para contabilizar las tasas de fotosíntesis P a la profundidad z en el océano (normalizada respecto a la tasa P_S) usamos un modelo para fotosíntesis (E-model) para fitoplancton con buenas capacidades de reparación del daño UV [9].

$$\frac{P}{P_S}(z) = \frac{1 - \exp(-E_{PAR} / E_S)}{1 + E_{UV}^*} \quad (5)$$

Indicando E_S la eficiencia de la especie en el uso de la radiación fotosintéticamente activa, inversamente proporcional al rendimiento cuántico de la fotosíntesis. Mientras más pequeño es E_S , mayor es la eficiencia.

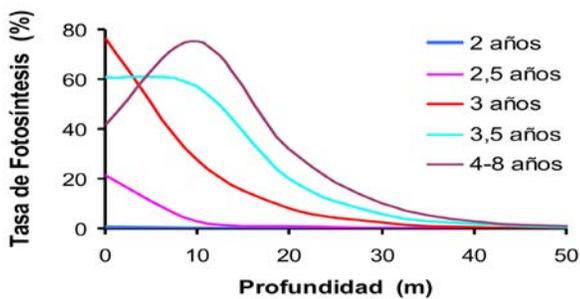


Figura 1: Tasas de fotosíntesis para aguas tipo III, ángulo zenital solar de 0° y parámetro de eficiencia $E_S = 25 \text{ W/m}^2$.

La figura 1 muestra el comportamiento de la tasa de fotosíntesis en diversos momentos después del impacto. Durante los dos primeros años la fotosíntesis fue bloqueada debido a la presencia de alto contenido de aerosoles en la atmósfera. Entre los 2.5 y 3 años la concentración de aerosoles es todavía relativamente alta por lo cual las tasas de fotosíntesis máximas se localizan cerca de la superficie del mar. A partir de los 4 años las tasas de fotosíntesis en la columna de agua oceánica muestran un comportamiento similar pues el contenido de aerosoles ha disminuido notablemente. Aunque el ozono se encuentra deprimido limitadamente (en recuperación), el agua oceánica actúa como un escudo protector de la nociva radiación UV, por lo que la tasa máxima se desplaza a mayor profundidad que en los años precedentes.

La zona fótica disminuye su espesor dependiendo del tipo de agua. Así en las aguas tipo I (mas claras) llega a los 200 m, las tipo II (intermedias) los 80 m y las tipo III alcanza solo los 50 m.

Hasta los 2.5 años después del impacto la productividad primaria es muy baja: la presencia de grandes cantidades de aerosoles impide o reduce drásticamente la radiación que llega a la superficie del océano. En el período de 2.5-4 años hay un incremento de la productividad primaria, asociado a la disminución de la concentración de aerosoles. Entre los 4 y 8 años la productividad primaria se estabiliza por las mismas causas que son similares las tasas de fotosíntesis analizadas (Figura 2).

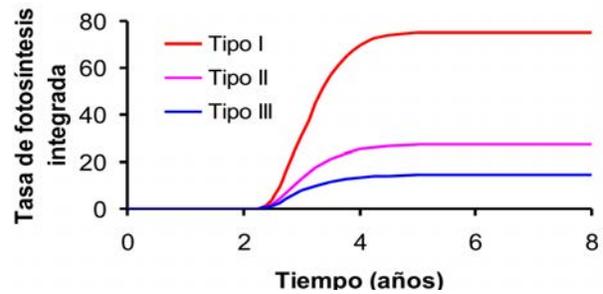


Figura 2: Tasas de fotosíntesis integradas para ángulo zenital solar de 0° y parámetro de eficiencia $E_S = 25 \text{ W/m}^2$.

La productividad primaria varía sustancialmente acorde a la eficiencia de la especie: los organismos menos eficientes son más inertes a los cambios en el tiempo que los más eficientes. Además, en las latitudes bajas la productividad primaria es mayor que en las altas, pues en las primeras la cantidad de radiación llegada a la superficie oceánica es mayor que en las segundas.

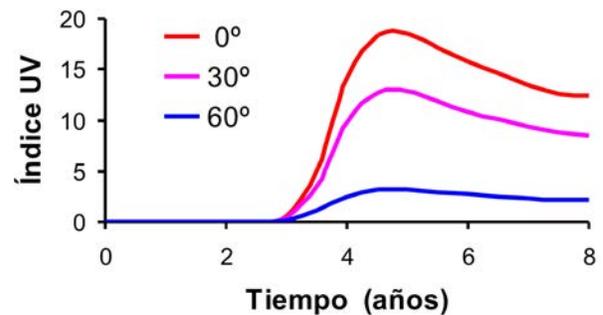


Figura 3: Índice UV en superficie oceánica en diferentes momentos después del impacto del asteroide para diferentes latitudes.

Los indicadores de daño biológico (daño al ADN, índice UV y peso del UV-B) en la superficie oceánica estimados mostraron sus máximos valores entre los 4.5 y 5 años después del impacto del asteroide, debido al efecto conjunto de un bajo nivel de aerosoles ($\sim 2.83\text{-}0.92 \text{ DU}$) y recuperación de la capa de ozono limitada ($\sim 66.7\%$ de O_3 respecto al nivel normal). El daño producido por la radiación UV es mayor en las bajas latitudes (mayor incidencia de radiación) que en las altas (Figura 3). El daño biológico está más controlado por la dinámica del ozono que por el nivel de aerosol en la atmósfera.

La productividad primaria post-impacto, durante el momento de mayor daño biológico en la superficie del océano, es mayor

que durante el crudo régimen radiacional del eón Arcaico (entre 3800 y 2500 millones de años atrás, cuando no existía capa de ozono). Esto se observa en la Figura 4.

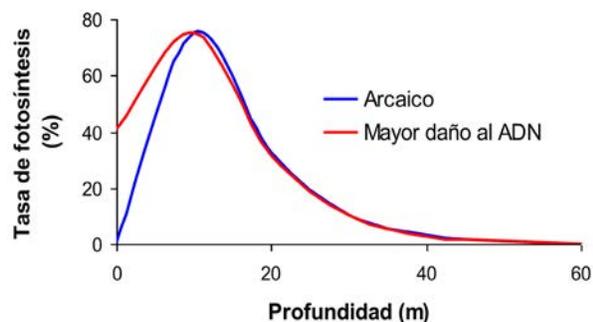


Figura 4: Tasas de fotosíntesis para escenarios Arcaico (azul) y post-impacto (rojo), con ángulo zenital solar de 0° , aguas tipo III y parámetro de eficiencia $E_s = 25 \text{ W/m}^2$.

En los primeros años la mayor influencia en la fotosíntesis es la oscuridad controlada por la presencia de los aerosoles, siendo el peor escenario durante los dos primeros años cuando se alcanzan los valores más altos. Al alcanzar la luz la superficie terrestre; el mayor efecto en el proceso de fotosíntesis así como en los indicadores de daño biológico, es regido fundamentalmente por la dinámica del ozono. La productividad del fitoplancton varió durante este proceso en función de los aerosoles y la columna de ozono, siendo esta dependencia menos sensible para las aguas de tipo II y III que la I. La recuperación comienza en las latitudes bajas para luego extenderse a las altas. La atmósfera en el momento de mayor daño al ADN después del impacto tiene mejores condiciones para albergar a los organismos fotosintéticos que durante el eón Arcaico.

[1] L.W. Alvarez, W. Alvarez, F. Asaro y H.V. Michel "Extraterrestrial cause for the Cretaceous-Tertiary extinction", *Science* 208, 1095 (1980).

[2] X. Tie and G. Brasseur "The response of stratospheric ozone volcanic eruptions: Sensivity to atmospheric chlorine loading", *Geophys. Res. Lett.*, 22, 3035 (1995).

[3] D. A. Kring "Ozone-depleting Cl and Br produced by the Chicxulub impact event", *Meteorit. Planet. Sci.*, 34, A67-A68 (1999).

[4] E. Pierazzo, A.N. Hahman and L.C. Sloan "Chicxulub and Climate: Radiative Perturbations of Impact-Produced S-Bearing Gases", *Astrobiology*, 1, 99 (2003).

[5] H. Ishida, K. Kaiho and S. Asano "Effects of a large asteroid impact on ultra-violet radiation in atmosphere", *Geophys. Res. Lett.*, 4:23 (2007).

[6] N. Jerlov "Applied Optics", Elsevier, Amsterdam, 2004.

[7] K. Shifrin "Physical Optics of Ocean Water", American Institute of Physics, New York, 1988.

[8] N. Perez, R. Cardenas, O. Martín and R. Rojas "Modelling onset of photosynthesis after Chicxulub asteroid impact", *Astrophys. Sp. Sc.*, 343 (2013).

[9] J. Fritz, P. Neale and J. Pelloquin "Response of Antarctic phytoplankton to solar UVR exposure: inhibition and recovery of photosynthesis in coastal and pelagic assembles", *Mar Ecol. Prog. Ser.*, 365:1 (2008)

SIMULACIÓN DE COMPUERTAS LÓGICAS CUÁNTICAS UNIVERSALES MEDIANTE UN MODELO DE CÓDIGO TÓRICO

SIMULATION OF UNIVERSAL LOGIC QUANTUM GATES BY USING A TORIC CODE MODEL

P. MARÍN^{a†} Y J. MAHECHA^a

a) Instituto de Física, Universidad de Antioquia, Colombia. dmarin29@gmail.com

† autor para la correspondencia.

PACS: Many-electron systems, theories of, 71.10.-w, Quantum computation, 03.67.Lx. Anyons, electronic structure, 71.10.Pm.

En la actualidad un tema de alto interés científico es la simulación cuántica de interacciones de espín de muchos cuerpos. Se destaca el modelo de código tórico, en el cual los espines se ubican en los bordes de una red cuadrada sobre la superficie de un toro. En este trabajo se identifica inicialmente el hamiltoniano del sistema. Si la red es de dimensión $k \times k$, el hamiltoniano será una matriz de dimensión $2^{2k} \times 2^{2k}$. Luego se obtiene el operador de evolución temporal del sistema de varios qubits. Ulterior a esto, se construyen compuertas lógicas cuánticas universales. Este trabajo puede tener importancia para establecer una representación de anyones mediante el modelo de código tórico, lo cual permitiría simular compuertas cuánticas topológicas.

Currently a topic of high scientific interest is the quantum simulation of many-body spin interactions. Toric code model is highlighted, in which the spins are located at the edges of a square lattice on the surface of a torus. In this paper the Hamiltonian of the system is initially identified. If the lattice is of dimension $k \times k$, the Hamiltonian is a matrix of dimension $2^{2k} \times 2^{2k}$. The many-qubit time evolution operator of the system is then obtained. Further to this, universal logic quantum gates are constructed. This work may have relevance to establish a representation of anyons by using the toric code model, which would simulate topological quantum gates.

INTRODUCCIÓN

El estudio de la computación cuántica requiere de un mecanismo tolerante a fallos para tratar con imperfecciones tales como errores de los estados físicos, errores en el material de la memoria, errores en las compuertas lógicas y errores en las medidas [1]. Se ha demostrado [2, 3, 4, 5], que el código de superficie, el cual es un tipo de computación cuántica tolerante a fallos [1, 6, 7], es robusto frente a los errores de pérdida y altamente tolerante a errores de los estados cuánticos. La teoría estabilizadora de corrección de errores cuánticos en computación e información cuántica, permite importar algunos códigos clásicos binarios o cuaternarios para utilizarlos como un código cuántico [8]. En este formalismo es conveniente expresar un estado cuántico como un único autovector simultáneo de operadores que conmutan $X \otimes X$ y $Z \otimes Z$. Estos operadores son llamados operadores estabilizadores, y en la manipulación acertada de estos radica el éxito del modelo tórico. El código de superficie junto con la teoría estabilizadora nos brindan las herramientas teóricas iniciales para la comprensión del código tórico.

Se emplea entonces el formalismo del código tórico para modelar interacciones de espín de muchos cuerpos en una red bidimensional, lo cual nos lleva inicialmente a obtener el hamiltoniano que representa el sistema y que es el primer objetivo a alcanzar. Se soluciona la ecuación de Schrödinger

dependiente del tiempo y se obtiene el operador evolución del sistema $U(t)$, el cual se empleará para simular la dinámica de un estado inicial bien construido según ciertos pulsos o intervalos de tiempo. Al caracterizar tal comportamiento se idea el mecanismo que permite la construcción de compuertas lógicas cuánticas universales.

CÓDIGO TÓRICO

Realmente, el código de superficie evoluciona de una invención del científico ruso Alexei Kitaev conocida como código tórico [2, 9]. Este surge de sus esfuerzos para desarrollar modelos simples que poseen un orden topológico, usando qubits distribuidos sobre la superficie de un toro. De forma general, el código tórico es un código de corrección de errores cuánticos y un ejemplo de código estabilizador definido sobre una red de espines bidimensional con condiciones de borde periódicas. Consideremos una red cuadrada $k \times k$ sobre la superficie de un toro (Figura 1), se ubica un espín o qubit en cada borde de la red (azules en la figura). Podemos decir que disponemos de $n = 2k^2$ qubits en total. Para la figura mostrada, que comprende una red 3×3 , tenemos que $n=18$. Para tal ejemplo, se contaron los qubits hacia la derecha empezando desde el qubit 1 hasta llegar al qubit 18. Los qubits de la línea vertical del extremo derecho de la red, junto con los de la línea horizontal inferior, representan, sobre el toro, qubits "repetidos". Al examinar por ejemplo los qubits conectados por las líneas **a** o **b**, sobre

la superficie del toro, vemos que representan el mismo qubit, y de igual manera con los demás pares. En la figura 1, se ha resaltado en rojo el subsistema de cuatro qubits, prototipo de una plaqueta **p**, y en verde el prototipo de un vértice **v**.

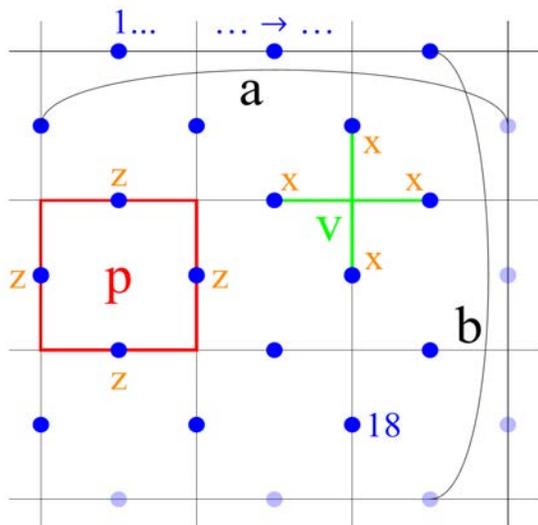


Figura 1. Esquema de un arreglo 3x3 del código tórico. Los puntos azules representan qubits.

Para cada vértice y cada plaqueta se consideran los siguientes operadores: $A_v = \prod_{i \in V} \sigma_i^{(x)}$, $B_p = \prod_{i \in p} \sigma_i^{(z)}$ donde $i \in V$ denota los bordes tocando el vértice V , e $i \in p$ denota los bordes que rodean la plaqueta p . Estos operadores conmutan unos con otros, debido a que plaquetas y vértices tienen ya sea 0 o 2 bordes en común, además, A_v y B_p contienen operadores de Pauli que representan interacciones de espín de cuatro cuerpos, es decir, $\sigma_i^{(x)}$ y $\sigma_i^{(z)}$ son matrices de Pauli aplicadas al qubit en el sitio i . A_v y B_p son también operadores hermiticos con autovalores 1 y -1, y por tanto constituyen un subgrupo abeliano del grupo de Pauli de n qubits, que es un grupo estabilizador [10, 11]. Los operadores A_v y B_p son los operadores estabilizadores del código tórico. Cumplen $\prod_v A_v = 1$ y $\prod_p B_p = 1$, y por tal razón hay $2k^2 - 2$ operadores estabilizadores independientes. Al considerar el espacio de Hilbert H de todos los $n = 2k^2$ qubits, se define un subespacio protegido L como: $L = \{|\xi\rangle \in H : A_v |\xi\rangle = |\xi\rangle, B_p |\xi\rangle = |\xi\rangle, \forall v, p\}$. Sobre el toro, el estado base del código tórico es cuatro veces degenerado y corresponde al autovalor 1 de todos los operadores que conmutan A_v y B_p y que exhiben orden topológico [2, 4, 12, 13, 14]. Decimos entonces que el subespacio protegido coincide con el estado base. Plaquetas o vértices con autovalor igual a -1 son cuasipartículas llamadas cargas magnéticas o cargas eléctricas respectivamente [7].

HAMILTONIANO

Los espines sobre la red interactúan a través del hamiltoniano:

$$H_{TC} = -\sum_v A_v - \sum_p B_p \quad (1)$$

El tamaño del espacio de Hilbert del sistema definido sobre una red cuadrada $k \times k$ es 2^{2k^2} y los operadores estabilizadores constituyen un conjunto completo de operadores que

conmutan con H_{TC} y por tanto todas las excitaciones de H_{TC} pueden ser etiquetadas por los autovalores ± 1 de los $2k^2 - 2$ operadores independientes. Se sigue además que, de la teoría general de códigos cuánticos aditivos [15], la dimensión del espacio protegido L es $2^{2k^2} / 2^{2k^2 - 2} = 4$, que corresponde al estado base 4 veces degenerado (Figura 2). Significa esto que hay $2^{2k^2} - 4$ estados excitados. Lo anterior es consistente con el hecho de que la degeneración del estado base para un hamiltoniano ordenado topológicamente de espín 1/2 definido sobre un toro es 4^g , con $g=1$ el género de la superficie [11, 13]. Tenemos entonces que el estado base coincide con el subespacio protegido L y que todos los estados excitados son separados por un gap de energía $\Delta E \geq 4$ (Figura 2) debido a que la diferencia entre los autovalores de A_v y B_p es 2.

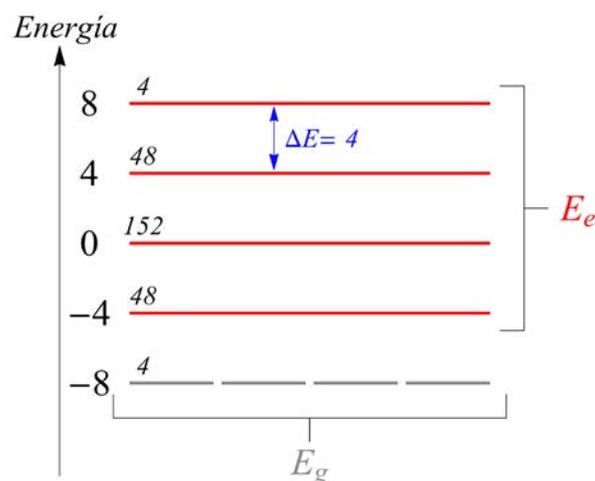


Figura 2. Esquema del espectro del hamiltoniano del código tórico para un arreglo 2x2. E_g representa el estado base cuatro veces degenerado, mientras que E_e representa los estados excitados. Los números a la izquierda sobre líneas representan la degeneración del estado.

ESTADO INICIAL

De entrada podemos suponer infinidad de arreglos iniciales donde se tienen espines orientados hacia arriba $|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ o hacia abajo $|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. El estado inicial por lo tanto, será un producto directo de dichos estados de espín en un determinado arreglo. La idea es que éste pueda evolucionar de manera que permita la construcción de compuertas lógicas cuánticas. Si se toma como estado inicial un autoestado del hamiltoniano (1) y lo evolucionamos mediante el operador $U(t)$, lo único que se obtiene es una fase adicional, es decir, $|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle = e^{-i\lambda t/\hbar} |\psi(0)\rangle$ donde λ representa un autovalor de energía de H_{TC} . Es claro entonces que tales autoestados no proporcionan una evolución del sistema ni una dinámica que permita simular compuertas lógicas cuánticas. Construiremos el estado inicial de tal manera que al evolucionar mediante $U(t)$ podamos identificar operaciones lógicas de qubits como compuertas universales NOT y CNOT.

APLICACIÓN DEL MODELO

Para el caso en que $k=2$ tenemos $n=8$ qubits y por tanto 8 operadores estabilizadores de los cuales 6 son independientes.

Debemos ubicar en la red 4 vértices y 4 plaquetas (Figura 3). El tamaño del espacio de Hilbert es $N=256$, donde el hamiltoniano del sistema es una matriz de dimensión $2^{2k^2} \times 2^{2k^2} = 256 \times 256$. Hay $2^{2k^2} - 4$ estados excitados, donde, en unidades de energía, partimos de 4 estados base (-8), 48 estados excitados (-4), 152 estados excitados (0), 48 estados excitados (4) y 4 estados excitados (8), figura 2.

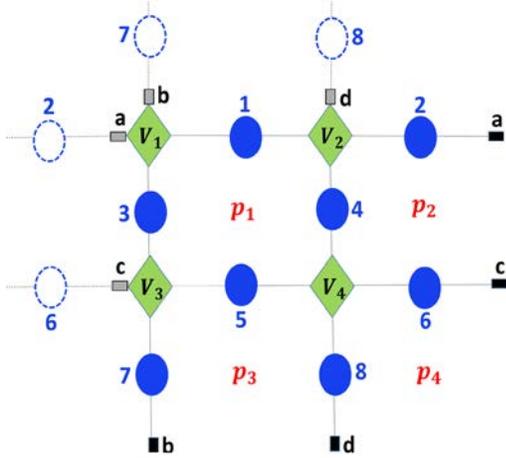


Figura 3. Arreglo de espines en una red 2x2 del código tórico. Las bolas azules representan los espines, los rombos verdes los cuatro vértices y las p_i representan las cuatro plaquetas. El esquema enfatiza en que la red cuadrada es sobre un toro al indicar las conexiones a,b,c,d.

Para $k=2$ y de acuerdo a la figura 3, tenemos los siguientes operadores de vértices y plaquetas: $A_{V1} = \sigma_2^x \sigma_1^x \sigma_7^x \sigma_3^x$, $A_{V2} = \sigma_1^x \sigma_2^x \sigma_8^x \sigma_4^x$, $A_{V3} = \sigma_6^x \sigma_5^x \sigma_3^x \sigma_7^x$, $A_{V4} = \sigma_5^x \sigma_6^x \sigma_4^x \sigma_8^x$, $B_{p1} = \sigma_1^z \sigma_3^z \sigma_4^z \sigma_5^z$, $B_{p2} = \sigma_2^z \sigma_4^z \sigma_3^z \sigma_6^z$, $B_{p3} = \sigma_5^z \sigma_7^z \sigma_8^z \sigma_1^z$, $B_{p4} = \sigma_6^z \sigma_8^z \sigma_7^z \sigma_2^z$ los cuales cumplen $\prod_V A_V = 1$ y $\prod_p B_p = 1$. Se verifica además que el espacio protegido L coincide con el estado base, y que los estados excitados están separados por un gap de energía $\Delta E=4$ al determinar los autovalores del hamiltoniano (1). El operador evolución $U(t)$ claramente define una matriz que nos permite evolucionar un estado inicial $|\psi(0)\rangle$ de 256 componentes.

COMPUERTAS CUÁNTICAS

Se formuló el estado inicial como una superposición de un estado base $|\psi_g\rangle$ y un estado excitado $|\psi_e\rangle$ del hamiltoniano en la forma $|0\rangle = 1/\sqrt{2}(|\psi_e\rangle + |\psi_g\rangle)$. Tal estado surge de aplicar una rotación \sqrt{Z} al estado base $|\psi_g\rangle$ en el espacio de Hilbert. Si se aplica \sqrt{Z} a un estado excitado $|\psi_e\rangle$, se obtiene un estado $|1\rangle = 1/\sqrt{2}(|\psi_g\rangle - |\psi_e\rangle)$ el cual es ortogonal a $|0\rangle$. \sqrt{Z} opera como una rotación de 45° en sentido contrario a las manecillas del reloj. Ahora, al evolucionar el estado $|0\rangle$ mediante $U(t)$ obtenemos un estado $|\psi(t)\rangle$ cuyas componentes diferentes de cero van a depender explícitamente de t . La idea es determinar para qué valores de t se cumple $|\psi(t)\rangle - |1\rangle = 0$. Se resuelve entonces el sistema de ecuaciones obtenido de la anterior operación para la variable t , y se determina el siguiente conjunto solución: $T = \{t_k = \pi/4(2k+1) : |\psi(t = t_k)\rangle - |1\rangle = 0, \forall k \in \mathbb{Z}\}$. Dado que $|0\rangle$ es ortogonal a $|1\rangle$ y que mediante la dinámica de $|0\rangle$ se puede obtener $|1\rangle$, consideramos ambos estados como estados de espín del sistema completo que brindan

la posibilidad de simular una operación NOT. Ahora, para determinar una operación CNOT la situación es un poco más compleja. Debemos idear la manera de identificar un estado $|0\rangle$ y un estado $|1\rangle$ para dos subsistemas dentro del mismo arreglo de espines. Seleccionamos como uno de los subsistemas las interacciones entre vértices y el otro como las interacciones entre plaquetas. Ahora, tal y como se planteó la operación NOT del sistema completo mediante estados ortogonales colectivos, es posible establecer estados de los subsistemas que permitan simular igualmente operaciones NOT, teniendo entonces estados $|0\rangle$ y $|1\rangle$ para cada subsistema. Se procede luego a determinar los estados $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$ y $|11\rangle$ los cuales brindan la posibilidad de simular una operación CNOT.

CONCLUSIONES

La computación cuántica sin duda alguna nos permite afrontar problemas físicos que poseen gran riqueza conceptual, y que dan un enfoque tanto teórico como experimental. El estudio de códigos de superficie como un tipo de computación cuántica tolerante a fallos, da entrada a un estudio que involucra el análisis de interacciones de muchos cuerpos y que a la vez permiten idear propuestas en la construcción de elementos tan imprescindibles en la computación cuántica como las compuertas lógicas. El modelo de código tórico, el cual representa interacciones de cuatro cuerpos dispuestos en una red bidimensional, mediante sus estados de espín colectivos, permite la construcción de un estado inicial tal que, al evolucionar mediante el operador $U(t)$ del sistema, se puede establecer un conjunto T de valores del tiempo que permiten simular una operación NOT. Al estudiar y analizar en detalle como simular una operación CNOT, se idea un mecanismo que permite construir estados $|i\rangle \otimes |j\rangle$, donde $|i\rangle$ y $|j\rangle$ representan estados ortogonales de subsistemas que surgen del mismo arreglo bidimensional de espines. Tales estados, siguiendo la idea de la operación NOT inicial, permitiría simular una operación CNOT.

[1] S. Nagayama, "Surface Code Quantum Computation on a Defective Physical Lattice". Tesis de Maestría, Keio University, 2011.
 [2] A. Y. Kitaev, Ann. Phys. 303, 2 (2003).
 [3] R. Raussendorf, y J. Harrington, Phys. Rev. Lett. 98, 190504 (2007).
 [4] R. Raussendorf, J. Harrington, y K. Goyal, 2007 New J. Phys. 9 199.
 [5] A. G. Fowler, M. Mariantoni, J. M. Martinis, y A. N. Cleland, Phys. Rev. A 86, 032324 (2012).
 [6] S. B. Bravyi, y A. Y. Kitaev, "Quantum codes on a lattice with boundary", arXiv:quant-ph/9811052v1 (1998).
 [7] E. Dennis, A. Kitaev, A. Landahl, y John Preskill, J. Math. Phys. 43, 4452 (2002).
 [8] D. Gottesman, "Stabilizer Codes and Quantum Error Correction". Tesis de Doctorado, California Institute of

Technology, Pasadena, California, 2008.

[9] A. Y. Kitaev, 1997 Russ. Math. Surv. 52 1191.

[10] O. Viyuela, A. Rivas, y M. A. Martin-Delgado, 2012 New J. Phys. 14 033044.

[11] C. Nayak, H. Simon, A. Stern, M. Freedman, y D. Sarma, Rev. Mod. Phys. 80, 1083 (2008).

[12] H. Weimer, Molecular Physics Vol. 111, Iss. 12-13, 2013.

[13] F. Pollmann, E. Berg, A. M. Turner, y M. Oshikawa, Phys. Rev. B 85, 075125 (2012).

[14] F. Pollmann y A. M. Turner, Phys. Rev. B 86, 125441 (2012).

[15] D. Gottesman, Phys. Rev. A 54, 1862 (1996).



ESTRATEGIAS DE ENSEÑANZA PARA UN APRENDIZAJE SIGNIFICATIVO EN LA FÍSICA EXPERIMENTAL

STRATEGIES OF TEACHING FOR A SIGNIFICANT LEARNING IN EXPERIMENTAL PHYSICS

A. D. RODRÍGUEZ[†]

Departamento de Física, Cujae, La Habana, Cuba; deysi@electronica.cujae.edu.cu[†]

[†] corresponding author

Keywords: Computers in education, 01.50.H-, 01.50.Lc, virtual laboratory 01.50.Lc, physics education, 01.40.-d, teaching methods 01.40.gb

En este trabajo se presentan resultados parciales de la elaboración y aplicación de estrategias de enseñanza concebidas para lograr la complementación mutua del experimento real y las simulaciones virtuales, facilitándose la formación en el estudiante de las acciones anteriormente mencionadas hasta su nivel mental de acuerdo a las etapas de apropiación que concibe de la teoría de formación por etapas de las acciones mentales (TFEAM) de Galperin contribuyendo así a elevar los niveles de significatividad y solidez en el aprendizaje de la Física a través de esta forma de enseñanza.

La computación ha sido empleada para simular fenómenos físicos en todas sus formas desde los más simples, tales como el movimiento mecánico de los cuerpos, hasta otros más complejos [1].

Las simulaciones virtuales de fenómenos físicos son ampliamente utilizadas en todas las formas en que se organiza el proceso de enseñanza-aprendizaje de la Física y en particular en el laboratorio docente [2, 3, 4].

En el laboratorio docente el estudiante ejecuta diferentes acciones tanto de carácter material como mental las cuales se mencionan a continuación:

1. Se motiva por aprender física.
2. Se orienta en cómo proceder para realizar el experimento.
3. Utiliza los diferentes instrumentos de medición.
4. Identifica unidades de medida de las magnitudes físicas objeto de medición.
5. Identifica las fuentes de errores en las mediciones.
6. Procesa los datos experimentales.

7. Construye e interpreta gráficas en diferentes escalas.

8. Extrae conclusiones sobre el experimento y las presenta por escrito en un informe.

9. Expone razonadamente a otros el experimento y sus conclusiones (incluyendo al profesor).

10. Se explica a si mismo los fenómenos físicos estudiados.

11. Diseña experimentos similares por si mismo/a.

12. Se representa mentalmente los fenómenos físicos estudiados.

13. Asimila los conceptos teóricos asociados al experimento.

En la investigación realizada se considera un aprendizaje significativo cuando en el proceso de asimilación se llega a la generalización y automatización de las acciones [5], incorporándolas a la estructura cognitiva de forma consciente, entendiéndose que un aprendizaje es sólido cuando los elementos fundamentales del contenido apropiado permanecen durante un tiempo prolongado en la memoria de largo plazo pudiendo ser recuperados por el aprendiz aún si no se han reactivado durante ese tiempo de manera consciente. En este sentido se considera que la solidez puede servir como medida de la significatividad.

Como es conocido, la TFEAM tiene una base esencialmente psicológica y social y considera que el aprendizaje transcurre a través de seis etapas que mencionamos a continuación:

- Etapa motivacional.
- Etapa de la elaboración de la base orientadora de la acción (BOA).

- Etapa material o materializada.
- Etapa del lenguaje externo.
- Etapa del lenguaje interno.
- Etapa mental.

Las estrategias de enseñanza propuestas están orientadas a facilitar la ampliación de la zona de desarrollo próximo (ZDP) del aprendiz durante el desarrollo del laboratorio, uno de los valiosos aportes de la teoría psicológica de L. Vygotski, a la enseñanza [6].

Tomando como punto de partida las características del proceso de enseñanza en el laboratorio docente de Física se emplearon las simulaciones virtuales en tres momentos diferentes [7].

- I. Previa a la realización del experimento real.
- II. Durante la realización del experimento real.
- III. Posteriores a la realización del experimento real.

Teniendo en cuenta las potencialidades didácticas de las simulaciones virtuales para contribuir al tránsito por las etapas las mismas se han clasificado en 5 tipos:

Tipo 1. Entrenadores virtuales de montajes de sistemas experimentales: Estas permiten que el estudiante se entrene en el montaje de sistemas experimentales sin que se corra el riesgo de que se dañen las componentes del sistema.

Tipo 2. Entrenadores virtuales de actos de medición: Estas permiten el entrenamiento con instrumentos de medición con cierto nivel de dificultad sin correr desarrollando la capacidad para leer e interpretar las escalas.

Tipo 3. Modelaciones dinámicas virtuales: Estas permiten materializar en imágenes dinámicas el modelo microscópico del experimento o estructuras del objeto en que se experimenta que no son visibles a simple vista.

Tipo 4. Simulaciones de experimentos en condiciones inaccesibles: Las mismas permiten realizar el experimento en condiciones imposibles de lograr en los experimentos reales.

Tipo 5. Simuladores rápidos de cambios de condiciones: Estas permiten observar el comportamiento del fenómeno o proceso en estudio en otras condiciones en cortos intervalos de tiempos, lo que resulta imposible de lograr en el experimento real en el tiempo planificado para realizarlo.

En las figuras 1, 2 y 3 se muestran esquemas de las estrategias de enseñanza propuestas, especificando sus objetivos, funciones y

la forma de realizar el control en cada una de estas.



Fig. 1. Esquema de estrategia preinstruccional.



Fig. 2. Esquema de la estrategia coinstruccional

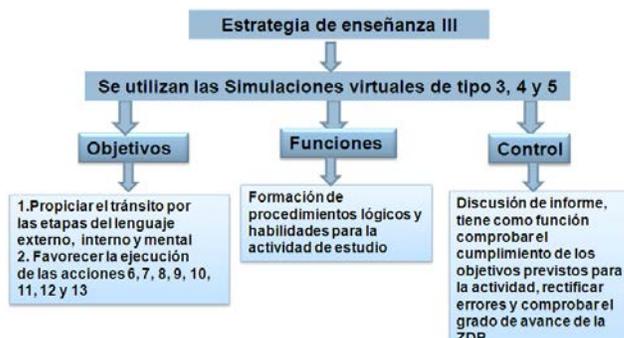


Fig. 3. Esquema de estrategia posinstruccional.

Las estrategias de enseñanza mostradas anteriormente se han utilizado con grupos de estudiante de primero y segundo años de Ingeniería Química, lográndose elevar los niveles de significatividad y solidez del aprendizaje de la Física a través de la forma de enseñanza laboratorio docente.

Los resultados han sido validados por test de significatividad (anexo I, resumido), en los que se evalúa el grado de apropiación de 6 elementos de contenidos presentes en el laboratorio docente de Física.

Tales test se aplicaron a los estudiantes de un grupo experimental y uno de control cuatro semestres después de haber terminado de cursar la disciplina Física General.

Para evaluar los resultados del test se definieron algunos índices cuantitativos expresados porcentualmente, estos son:

El índice de significatividad relativo (ISR) definido como:

$$ISR = \frac{NRC}{CRP} * 100$$

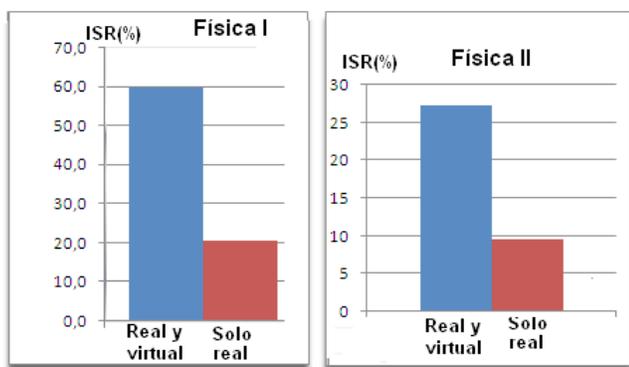
Donde: CRP es la cantidad de respuestas posibles, que se determina multiplicando el número de experimentos reportados por la cantidad de elementos que se incluyen en el test y NRC es la suma de todas las respuestas consideradas correctas según los criterios de calificación asumidos.

El índice de complementariedad relativo (ICR) definido como:

$$ICR = \frac{RC}{NTP} * 100$$

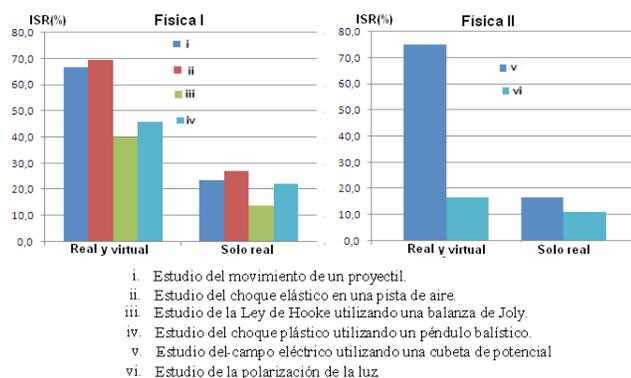
Donde: RC representa el número de aciertos o respuestas correctas y NTP corresponde al número total de prácticas relacionadas por los estudiantes.

La gráfica 1 muestra el comportamiento del ISR para ambas muestras de estudiantes.



Gráfica 1. Comportamiento comparativo del ISR para ambas muestras de estudiantes.

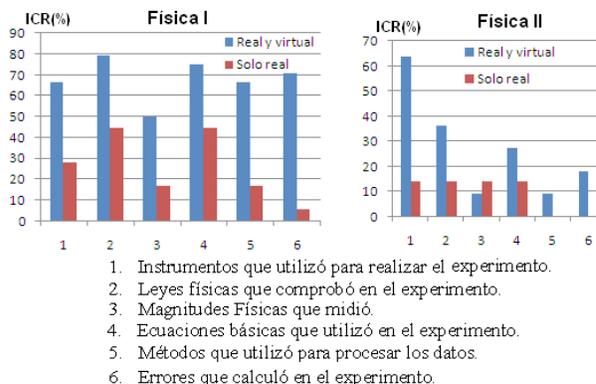
En el mismo se evidencia que aquellos alumnos que realizaron las prácticas con apoyo virtual aplicando las estrategias lograron un aprendizaje más duradero y en la misma medida más significativo.



Gráfica 2. Comportamiento comparativo del ISR por cada experimento.

La gráfica 2 muestra el mismo indicador pero por cada experimento apreciándose igual resultado en cada práctica.

En la gráfica 3 se muestra el resultado del índice de complementariedad relativo ICR para cada elemento de contenido objeto de aprendizaje.

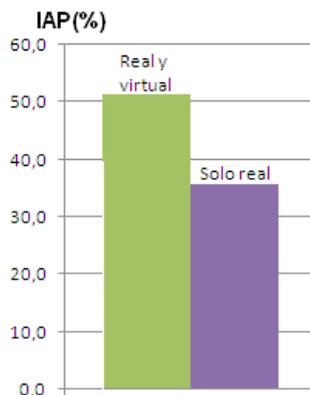


Gráfica 3. ICR por elementos de contenido.

Otro tercer índice definido y evaluado es el denominado índice de apreciación personal (IAP). El mismo se define como:

$$IAP = \frac{RM}{CRP} * 100$$

Donde RM: representa la cantidad de respuesta "Mucho" y CRP: es la cantidad de respuestas posibles.



Gráfica 4. Comportamiento comparativo del IAP para ambas muestras de estudiantes.

El índice de apreciación personal permite evaluar cuantitativamente como aprecian los estudiantes el aporte del laboratorio docente a su formación profesional.

La gráfica 4 muestra también un valor más alto para este índice en los estudiantes que complementaron los experimentos reales con las simulaciones virtuales de los mismos.

A modo de conclusiones se puede decir que la aplicación de las estrategias de enseñanza concebidas pone de manifiesto la posibilidad real de lograr niveles más altos de significatividad y solidez en el aprendizaje de la Física en el laboratorio docente.

[1] K. Martínez, y R. Revilla, "Simulaciones virtuales complementarias a la asignatura de Física" TICEC'05, (2005).
 [2] G. Ortega-Zarzosa, "Influencia en el aprendizaje de los alumnos usando simuladores de Física" Lat. Am. J. Phys. Educ. Vol. 4, Suppl. 1, (2010).
 [3] M. Re, L. Arena, "A história da Física como organizador prévio: Estratégia facilitadora para uma apremdizagem significativa" Revista Iberoamericana de Educación en Tecnología y Tecnología en Educación No.8. (ISSN: 1850-9959), (2012).
 [4] A. D. Rodríguez y J. J. Llovera, "Estudio comparativo de las potencialidades didácticas de las simulaciones virtuales y de

los experimentos reales en la enseñanza de la Física General para estudiantes universitarios de ciencias técnicas" Lat. Am. J. Phys. Educ. Vol. 4, No.1, (2010).
 [5] N. F. Talizina, "Conferencias sobre Los Fundamentos de la Enseñanza en la Educación Superior". Departamento de Estudios para el Perfeccionamiento de la Educación Superior, La Habana, 1984. (Pág. 193-220)
 [6] L. S. Vygotski, Pensamiento y Lenguaje. Obras Escogidas. t.2 p.p. 246-247. Ed. Progreso, Moscú, 1956.
 [7] F. Díaz Barriga. y G. Hernández, "Estrategias docentes para un aprendizaje significativo". Ed. OFGLOMA SA. p.p . 13-31. (2000)

ANEXO I TEST DE SIGNIFICATIFIDAD (ABREVIADO PARA ILUSTRAR)

TEST PARA EVALUAR SOLIDEZ Y SIGNIFICATIVIDAD DEL APRENDIZAJE MEDIANTE EL LABORATORIO DE FÍSICA														
<p>Apreciado estudiante: Este test tiene por objetivo comprobar cuan sólido y significativo fue para ti el aprendizaje de la Física mediante el laboratorio docente. El test forma parte de una importante investigación... Confiamos mucho en la veracidad de la información que nos puedas aportar... Muchas gracias por tu colaboración.</p>														
Nombre y apellidos:			Especialidad:			Grupo en 1er. año:		Grupo en 2do. Año:		Grupo actual:				
<p>Pregunta 1. A continuación te relacionamos un conjunto de prácticas de laboratorio las cuales realizaste durante el curso. Elige dos y completa en las columnas correspondientes los aspectos que se te preguntan de cada una según recuerdes. Se relacionan aparte por números los elementos de contenido para facilitarte la identificación.</p>														
Práctica realizada	Forma en que la hice (X)				A Instrumentos que utilicé	B Magnitudes físicas que medí	C Ley o leyes fundamentales que comprobé o apliqué	D Fórmulas básicas que utilicé	E Métodos con que procesé los datos	F Tipos de errores que calculé	¿Cuánto me ayudó esta práctica para entender la Física? (X)			
	Solo real	Solo virtual	Real y virtual	No la hice							Mucho	Regular	Poco	Casi nada
Movimiento del proyectil														
Otras prácticas														
<p>Pregunta 2. De una de las dos prácticas elegidas explica brevemente los componentes de que contaba el sistema experimental y qué operaciones realizaste durante el experimento. Utiliza el dorso de esta hoja.</p>														

RELACIÓN DE ELEMENTOS DE CONTENIDO A ASOCIAR CON LAS PRÁCTICAS DE LABORATORIO REALIZADAS					
A	Instrumentos que utilicé.	1. Regla graduada 2. Cronómetro	3. Medidor de aceleración 4. ..	5. Luxómetro 6. Termómetro 7. ..	8. Ocular con micrómetro 9. Frecuencímetro.
B	Magnitudes físicas que medí.	1. Distancia 2. Tiempo 3. Masa	4. Módulo de elasticidad 5. ..	6. Cantidad de movimiento 7. ...	8. Fuerza electromagnética 9. ...
C	Ley o leyes fundamentales que comprobé o apliqué.	1. 1ra. Ley de Newton 2.	3. Ley de Gravitación universal. 4.	5. Ley de Hooke. 6. Ley de Gauus.	7. Ley de Faraday. 8. Ley de Brewster
D	Fórmulas básicas que utilicé.	1. $F = ma$ 2. $v(t) = v_0 + at$ 3.	4. $F = k x$ 5. $F = q E + qV x$ 6.	7. $W = \Delta K$ 8. $W_{F. \text{disip.}} = \Delta E_{\text{mec.}}$ 9.	10. $F = k q Q/r^2$ 11. $(F/A) = E (\Delta y/y)$ 12.
E	Métodos con que procesé los datos.	1. Estimación puntual	3. Construcción de gráficos utilizando un procesador de textos.	4. Representación gráfica de una relación lineal	8. Representación gráfica en escala polar
F	Tipos de errores que calculé.	1. Cota de error sistemático (medición directa)	2. Cota de error total 3.	4. Intervalo de confianza 5.	6. Cota de error relativo 7. ...

INSTRUMENTOS PARA LA PREPARACIÓN DE ESTUDIANTES DE FÍSICA EN EL PREUNIVERSITARIO

INSTRUMENTS FOR THE PREPARATION OF PHYSICS STUDENTS IN HIGH SCHOOL

J. MORA

Instituto Preuniversitario Vocacional de Ciencias Exactas, Matanzas, Cuba; josemm@rimed.cu

Keywords: Physics education, 01.40-d educational aids, 01.50.-l textbooks for undergraduates, 01.30.mp

INTRODUCCIÓN

Teniendo en cuenta las dificultades detectadas en la preparación de los alumnos para los exámenes finales de Física de la enseñanza media en los cursos del 2010 al 2014 y las insatisfacciones que existen entre los profesores para la preparación de alumnos de alto rendimiento, se decidió hacer este trabajo.

Los instrumentos que lo integran parten desde el nivel básico, por tanto, pueden ser utilizados en la preparación de los estudiantes del curso general, hasta llegar a los niveles de los concursos nacionales y las olimpiadas. Por esta razón, los instrumentos pueden ser útiles, tanto en la preparación de alumnos de alto rendimiento con vista a las olimpiadas internacionales, o simplemente como apoyo para impartir las clases del ciclo general en el preuniversitario.

SITUACIÓN ACTUAL Y PROPUESTA

Cuando se analizan los resultados de los exámenes finales del 12 mo. grado y las olimpiadas internacionales de la asignatura de Física se aprecia que existen dificultades para el entrenamiento de los alumnos pues no se cuenta con materiales didácticos lo suficientemente elaborados orientados a este fin.

Los libros de texto utilizados actualmente [1-3] han jugado un papel importante, fueron elaborados por profesores cubanos, pero cuentan ya con más de 20 años de haberse elaborado y hoy no satisfacen totalmente las necesidades de preparación de nuestros estudiantes.

Las principales dificultades que presentan los libros de textos actuales son:

- i) Han existido varios textos para un mismo grado, cuando lo óptimo es que todo el contenido esté en un único libro.
- ii) La unidad de dinámica de la rotación, no se encuentra en ninguno de los textos vigentes.

ii) Nuestros textos no cuentan con el número suficiente de problemas resueltos para poder facilitar la comprensión de la asignatura ilustrando los métodos de solución.

iii) Los mismos no se encuentran en formato digital y no pueden ser integrados con las nuevas tecnologías.

iv) Los problemas que se tratan, no tienen el nivel de profundidad suficiente, que permita a los alumnos desarrollar sus potencialidades al máximo.

Respecto a los materiales dedicados a los alumnos de alto rendimiento que se disponen, los mismos tienen más de 20 años de uso. Aunque su calidad científica es excelente, no están actualizados y es muy difícil tener acceso a ellos, pues no se han vuelto a publicar.

Estas razones han motivado la elaboración de una guía metodológica siguiendo el programa vigente de 10mo. grado que consta de tres partes:

1era Parte: Se expone la teoría de cada tema, demostrándose las ecuaciones fundamentales, y con la ayuda de los problemas resueltos (80), se muestran las habilidades básicas. Después de cada epígrafe se proponen tareas, de 10 a 15 ejercicios simples. En esta parte se incluyen prácticas de laboratorio, con sus instrucciones.

2da Parte: Se brinda una selección de problemas propuestos (460) ordenados con nivel de complejidad ascendente. Algunos de estos problemas son originales, otros se han aplicado en los últimos 10 años en nuestros concursos nacionales, el resto son publicados en la revista especializada *Kvant* (libre en internet) [4] o son tomados de otros autores [5-8].

3ra Parte: Se brindan las soluciones o respuestas de todos los problemas propuestos, ordenados de forma tal, que garantice el desarrollo de los estudiantes.

IDEAS DIRECTRICES SEGUIDAS PARA LA SELECCIÓN DE LOS PROBLEMAS Y TAREAS PROPUESTAS Y SUS SOLUCIONES

- Profundizar más en la aplicación de los conceptos y la teoría. Por ejemplo, cuando se estudia la segunda ley de Newton, el objetivo fundamental es calcular la aceleración de un cuerpo y se pasa por alto el estudio de los pares de acción y reacción. Si no se interpreta correctamente la tercera ley de Newton, es imposible resolver problemas de sistemas de cuerpos, y finalmente comprender la ley de conservación de la cantidad de movimiento. Este es un aspecto donde el curso de décimo grado actual se queda a un nivel muy elemental.

- Demostrar todas las ecuaciones fundamentales. Las demostraciones en física tienen una importancia vital para poder comprender la teoría y garantizar el rigor científico. Aunque los libros de texto demuestran muchas de las ecuaciones fundamentales, existen demostraciones que pueden brindársele al estudiante con un mayor rigor.

- Se trata de resolver problemas por distintas vías de solución. Sólo así, el alumno puede ganar en visión y habilidades acorde a sus potencialidades, para poder aplicarlas con los distintos métodos de solución.

- Desarrollar un grupo de tareas para atender las necesidades de los alumnos con mayores dificultades. Aunque este trabajo pretende llegar a satisfacer las exigencias de los alumnos de alto rendimiento, se ha pretendido cubrir también a los estudiantes que no participan en el movimiento de los concursos. Es por esta razón que al final de cada epígrafe, se proponen de 10 a 20 ejercicios de tarea, que tienen un nivel inferior a los problemas propuestos y los ejemplos resueltos. Dichos ejercicios están al nivel de los exámenes que se aplican actualmente en los trabajos de control parciales y evaluaciones frecuentes de nuestras escuelas.

- Fomentar el desarrollo de habilidades experimentales. Durante los últimos años, el trabajo experimental en la enseñanza de física en el preuniversitario fue perdiendo protagonismo. Con la entrada de las dotaciones de nuevo equipamiento, se abren nuevas posibilidades para su rescate, por esta razón en la primera parte se incluyen prácticas de laboratorio con las indicaciones pertinentes para su realización. En las primeras se muestran todas las indicaciones, con tablas gráficas y demostraciones de las ecuaciones de trabajo. El alumno sólo tiene que montar el sistema experimental según un esquema que se muestra en una figura, medir y llenar las tablas. También se explica cómo aplicar la teoría de errores.

Según van agregándose prácticas, estas explicaciones van siendo menos detalladas para que los alumnos ganen en habilidades. Las prácticas propuestas están acorde con el equipamiento disponible en las escuelas, priorizando el uso de los instrumentos más simples: reglas, cronómetros, dinamómetros, etc.

También se hace referencia a técnicas de computación más sofisticadas como el programa Tracker [9] y otras. Pero las prácticas propuestas se basan en los instrumentos más simples.

- Los resultados de Cuba en las olimpiadas internacionales de Física han sido inferiores en los últimos años, entre las causas está la falta de materiales para la preparación de los alumnos. El presente trabajo está encaminado a resolver esta situación, pues los alumnos y entrenadores pueden contar con un material básico para su preparación.

- Se ha tratado de reformular distintos problemas, para proponer de tres a dos con las mismas características, de uno de estos se ofrece la solución completa y en el resto se ofrecen sólo las respuestas. Los libros de texto vigentes no ofrecen las soluciones de los problemas.

Dada la extensión del material, se decidió hacer una versión reducida, para los estudiantes que no están interesados en participar en los concursos. Dicha versión reducida de estos instrumentos, se ofreció en formato digital a los alumnos en el curso 2013-2014. En el próximo curso se dispondrá de una copia impresa de los mismos en cada mesa de trabajo.

La versión completa para los alumnos que se preparan para los concursos nacionales, se ha entregado en formato digital a los entrenadores de las distintas provincias, con muy buena aceptación por parte de alumnos y profesores.

CONCLUSIONES

La concepción y elaboración de estos instrumentos es el resultado de la experiencia acumulada en la docencia por más de 25 años y por 15 años en el entrenamiento de la preselección nacional de Física a las olimpiadas internacionales.

Con su implementación se ha contribuido a mejorar la enseñanza de la asignatura desde la base, para de esta forma, no solo influir en los resultados de las olimpiadas internacionales sino también en los resultados obtenidos por los estudiantes en el aprendizaje de la Física en la escuela media cubana.

[1] C. Sifredo, et.al, "Física 10mo. Grado". Edit. Pueblo y Educación. La Habana (1990).

[2] C. Sifredo, et.al, "Física 11mo. Grado". Edit. Pueblo y Educación. La Habana (1990).

[3] C. Sifredo, et.al, "Física 12mo. Grado". Edit. Pueblo y Educación. La Habana (1990).

[4] Revistas "Kvant" [ISSN 0130-2221],10,1(<http://kvant.mccme.ru/>) (2014).

[5] I.E. Írodiv, "Problemas de Física General". Editorial Mir. Moscú (1985).

[6] S. M. Kosel, "Problemas de Física General". Editorial Mir. Moscú (1986).

[7] Y. A. Sachenkov, "Problemas de Física". Editorial Mir. Moscú (1989).

[8] V. S. Volkenstein. "Problemas de Física General". Editorial Mir. Moscú (1970).

[9] D. Brown. Video Modeling."Tracker" 2,2 (www.cabrillo.edu/~dbrown/tracker/) (2013)

MODELO DE LOS DOS CUERPOS: SU ROL EN EL DESARROLLO HISTÓRICO DE LA FÍSICA Y SU USO EN LA ENSEÑANZA DE LA FÍSICA GENERAL

THE TWO BODIES MODEL: ITS HISTORICAL IMPORTANCE IN THE DEVELOPMENT OF PHYSICS AND ITS USE IN GENERAL PHYSICS TEACHING

L. M. MÉNDEZ-PÉREZ[†], L. A. MATOS, E. J. ROCA-ORIA

Departamento de Física, Facultad de Ciencias Naturales, Universidad de Oriente, Santiago de Cuba, 90500, Cuba; lmendezp@cnt.uo.edu.cu
[†] autor para la correspondencia.

Palabras clave. Atoms theory of, 31.10.+z, Physics Education 01.40.-d, History of science, 01.65.+g

El desarrollo histórico de la física muestra, entre otras, dos grandes revoluciones, una a fines del siglo XVII y otra a principios del XX, la primera culmina con la publicación en 1886 por I. Newton [1] de su obra "Philosophie Naturalis Principia Mathematica", en tanto la segunda comienza en 1913, cuando Bohr [2] publica su trabajo "On the constitution of Atoms and Molecules".

Históricamente, el problema de los dos cuerpos surge al tratar de explicar los movimientos observados de los planetas alrededor del Sol, según la descripción heliocéntrica de Copérnico.

Newton, utilizando el problema de los dos cuerpos y partiendo de las leyes de Kepler, deduce que la fuerza que el Sol ejerce sobre un planeta tiene que ser del tipo $(1/r^2)$, cuando plantea [1] en su Sección III Proposición XI Problema VI: Si un cuerpo gira en una elipse, encuéntrese la ley de la fuerza centrípeta que tiende hacia el foco de la elipse.

Este problema en los textos de Física General, por ejemplo en [3, 4], no se plantea. Se resuelve el problema inverso, o sea, supuesta conocida la ley de Gravitación Universal, que se plantea de forma directa, se deduce la tercera ley de Kepler del movimiento planetario.

Históricamente, esta concepción de Newton significa una síntesis de algunos de los principales descubrimientos y resultados científicos anteriores, entre ellos, fundamentalmente, los relativos a los movimientos:

1. rectilíneo uniformemente variado (caída libre de los cuerpos), investigado por Galileo.
2. parabólico (proyectiles), estudiado por Galileo.

3. circular uniforme, incluida la fuerza centrípeta, definidos por Huygens.

4. elíptico (planetas), establecido por Kepler empíricamente.

De esta forma, el modelo de los dos cuerpos, representando a un planeta cualesquiera y al Sol, permitió a Newton, en combinación con sus leyes del movimiento y las de Kepler, establecer, por deducción, la ley de Gravitación Universal y, con ella, este tipo de interacción, válida tanto en La Tierra como en los cielos, en contra de las ideas aristotélicas predominantes en esos tiempos.

En 1913, Bohr publica su trabajo [2], donde fundamenta un modelo atómico planetario. En los libros de texto, usualmente, el modelo de Bohr del átomo de hidrogeno es presentado con cierto detalle, como aparece en [3, 4], a partir del establecimiento de sus dos postulados:

Primer postulado: El electrón se mueve en torno al núcleo en orbitas circulares estables, constituyendo un modelo de dos cuerpos, el electrón con carga eléctrica negativa y el núcleo cargado positivamente, por lo cual interactúan eléctricamente siguiendo la ley de Coulomb.

Bajo esta interacción, y en concordancia con la segunda ley de Newton del movimiento, se introduce la condición *ad hoc* de que el módulo del momento angular L del electrón está cuantizado, para que el electrón acelerado no irradie energía, en contra de lo que predice la Electrodinámica Clásica, y no colapse hacia el núcleo, para que no pierda el átomo, por tanto, su estabilidad.

Segundo postulado: El electrón, al variar su energía, la libera

o la absorbe en forma de un quantum y, en el proceso, se satisface la ley de conservación de la energía.

Históricamente, la concepción de Bohr también es una síntesis de los principales descubrimientos y resultados científicos que se publicaron en los quince años precedentes, fundamentalmente:

1. El descubrimiento y determinación de la relación entre la carga eléctrica y la masa del electrón (e/m), realizado en 1897 por J. J. Thomson.

2. La identificación, entre los años 1899 y 1900, de los rayos beta y los electrones, obtenida, independientemente, por Rutherford, Becquerel, Geitel, Elster y Meyer.

3. El establecimiento por M. Planck, en 1900, del quantum de acción, para explicar la emisión de energía radiante del cuerpo negro en paquetes o quanta de energía.

4. La generalización de las ideas de Planck por A. Einstein en 1905 para la explicación del efecto fotoeléctrico, relativas a que no solo la energía radiante se emitía sino que también se transmite y absorbe en forma de quanta.

5. El modelo del átomo creado por J. J. Thomson, en 1903, constituido por una esfera cargada positivamente y electrones negativos incrustados en ella.

6. La teoría elaborada por Rutherford en 1911 para explicar el hecho de que las partículas alfa, que inciden sobre una lámina metálica delgada, se desvían ángulos mayores que un recto con respecto a la dirección de incidencia.

El modelo de dos cuerpos representando a un electrón y al núcleo permitió a Bohr, en combinación con las leyes de Newton del movimiento y la ley de fuerza de la interacción electrostática de Coulomb, establecer el primer modelo

atómico semiclásico (semicuántico) del hidrógeno.

La representación semiclásica del átomo por el modelo de Bohr en el modelo de los dos cuerpos, es la primera y única en toda la física que mantiene vigencia desde el punto de vista didáctico, pese a todas las transformaciones debidas al desarrollo posterior de la Mecánica Cuántica, en la cual también el átomo se representa por el modelo de dos cuerpos.

El empleo del modelo de los dos cuerpos permitió establecer la Ley de Gravitación Universal -que revolucionó el conocimiento científico- a partir de las leyes de Kepler, por lo que es recomendable que, en la enseñanza de la Física General, se siga este enfoque histórico (limitándose a órbitas circulares) y no el opuesto que usualmente aparece en los textos.

Así, el modelo de los dos cuerpos en el estudio del movimiento de dos partículas, con masas o cargas eléctricas conocidas, sometidas a las interacciones centrales correspondientes, posee un alto valor heurístico, dada su aplicabilidad en el estudio de muchos sistemas físicos correspondientes a diferentes teorías físicas.

[1] I. Newton, "Principios Matemáticos de la Filosofía Natural". Edición de A. Escotado, Editora Nacional, Madrid, España 1982.

[2] N. Bohr, *Phil. Mag.* 26 (1913) 476.

[3] F. W. Sears, M. W. Zemansky, H. D. Young, R. A. Freedman *Física Universitaria 10ma Edición*, Vol. I, Parte II. Pearson-Addison Wesley. Mexico 2002, pág. 437.

[4] R. Resnick, D. Halliday, K. S. Krane *Física Vol 2*, 12da Impresión, Compañía Editorial Continental, México 2001, pág. 399-385.

LOS LABORATORIOS-PROYECTOS COMO ESTRATEGIA DIDÁCTICA A TRAVÉS DEL DESARROLLO DE COMPETENCIAS INVESTIGATIVAS

PROJECT LABORATORY AS A DIDACTIC ESTRATEGY THROUGH THE DEVELOPMENT OF COMPETENCIES IN RESEARCH

M. A. BATISTA-ZALDÍVAR^{a†}, P. A. MARIÑO-CASTELLANOS^a Y S. L. GONZÁLEZ-BELLO^a

a) Departamento de Física-Química-Electrónica, Universidad Holguín, Cuba; pamarcast@facing.uho.edu.cu†

† autor para la correspondencia

PACS: Laboratory procedures, 06.60.-c; physics education, 01.40.-d; teaching methods, 01.40.gb

El tema de las prácticas de laboratorio en Física ha sido tratado por numerosos autores [1, 2, 3, 4, 5], de manera general estos autores coinciden en que habitualmente los trabajos de laboratorio se conciben como simples manipulaciones, con un carácter de simples "recetas" y se plantea la ausencia de muchos de los aspectos fundamentales para la construcción de conocimientos científicos.

Sin embargo, coincidimos con el hecho de que se debe seguir investigando en cómo habría que reorientar las prácticas de laboratorio para que los estudiantes tengan ocasión de participar en la elaboración de diseños experimentales, en vez de seguir guías detalladas ya preparadas por los profesores, dado el papel central que juega dicho diseño en la investigación y, muy en particular, para que adquieran una correcta visión de las relaciones ciencia-tecnología [6].

En la Universidad de Holguín se ha investigado el papel de las prácticas de laboratorio en el proceso de enseñanza-aprendizaje de la Física General. Diagnósticos realizados [7, 8, 9], revelaron que el método tradicional de trabajo en los laboratorios, donde los estudiantes siguen paso a paso las orientaciones de los docentes, promueve un aprendizaje eminentemente reproductivo, lo cual no se corresponde con las aspiraciones del actual plan de estudio D, que exige un nivel productivo en el aprendizaje de la Física y el desarrollo de habilidades experimentales que pueden ser mejor tratadas como la integración de conocimientos, habilidades y modos de actuación y evaluándolas sobre la base de competencias investigativas, entendidas estas como "Un conjunto identificable y evaluable, de conocimientos, habilidades, valores y actitudes relacionadas entre sí, que permiten desempeños satisfactorios en situaciones reales de trabajo" [10]. Coincidimos además con el hecho de reconocer las competencias como una cualidad humana [11].

Teniendo como base las experiencias acumuladas en la impartición de la disciplina Física Experimental durante 7 cursos en la carrera de Licenciatura en Física en la Universidad de Oriente, en esta investigación se propone elaborar e implementar una estrategia didáctica para potenciar la formación y desarrollo de habilidades experimentales de Física en estudiantes de las carreras de ingeniería, a través de las competencias investigativas; sustituyendo los trabajos de laboratorio que se desarrollaban tradicionalmente por Laboratorios-Proyectos (L-P), de manera que el estudiante juegue un papel protagónico en el desarrollo del proceso de enseñanza-aprendizaje. He aquí lo novedoso de este trabajo.

El L-P es una clase de laboratorio en el cual los estudiantes diseñan la forma de cumplir con los objetivos del laboratorio, a través de la solución de la situación física planteada, dando cumplimiento a los objetivos instructivos y habilidades experimentales integrándolas según los modos de actuación de la carrera y evaluándolas a través de competencias investigativas.

Para buscar los indicadores que nos permitieran evaluar las competencias investigativas consideramos que estas están compuestas por unidades de competencias, que a su vez se subdividen en elementos de competencias [12], a partir de los cuales y sobre la base de evidencias se evalúa el desempeño para determinar la evolución de las competencias en los estudiantes.

Como unidades de competencia proponemos las siguientes: Buscar información, formular hipótesis, trabajar en equipo, diseñar estrategias experimentales y ponerlas en práctica, resolver problemas experimentales, argumentar y exponer ideas, interpretar y analizar los resultados, elaborar, presentar y discutir informes.

La estrategia didáctica fue aplicada a 34 estudiantes del segundo año de la carrera de Ingeniería Industrial, seguidamente presentamos la evolución de algunos de los elementos de competencias luego de aplicada dicha estrategia.

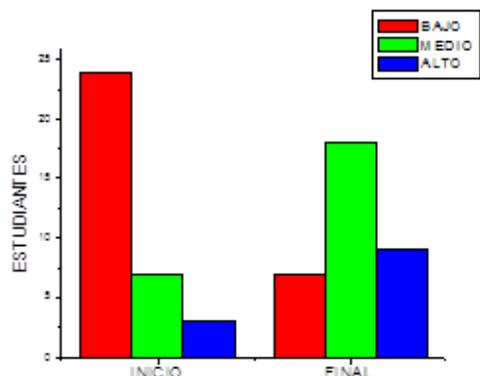


Figura 1. Localiza las fuentes de información adecuadas.

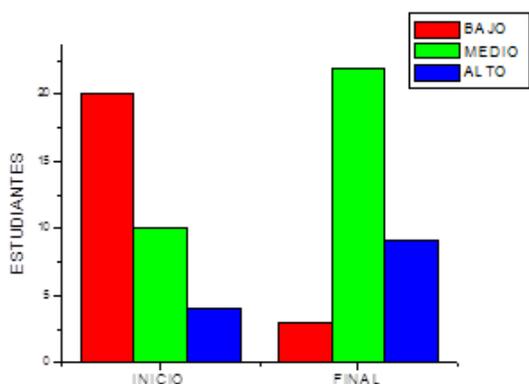


Figura 2. Selecciona críticamente la información.

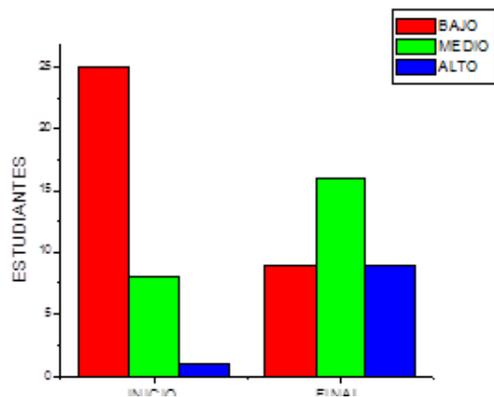


Figura 3. Identifica el problema dentro de una temática.

Los elementos de competencias de las figuras 1 y 2 corresponden a la unidad de competencia buscar información; los de las figuras 3 y 4 a resolver problemas experimentales y los de las figuras 5 y 6 mostradas en la página siguiente a la unidad de competencia exponer ideas de forma clara y precisa y argumentar respectivamente.

Realizando una comparación de la evolución de cada uno de los elementos de competencias al inicio y al final de aplicada la estrategia se evidencia que en todos los casos

hay una significativa mejoría en el grupo que realizaron los laboratorios-proyectos en cada uno de los elementos de competencias analizados, lo que demuestra la efectividad de la estrategia didáctica propuesta para la formación y desarrollo de competencias investigativas en los estudiantes, además de un aumento importante en la motivación por la actividad experimental, que era mínima en los estudiantes de esta carrera antes de la estrategia utilizada a pesar de que esta estrategia didáctica requirió de los estudiantes un mayor tiempo de trabajo independiente.

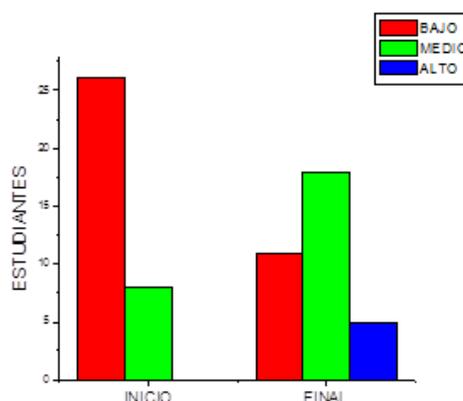


Figura 4. Diseña y ejecuta la propuesta.

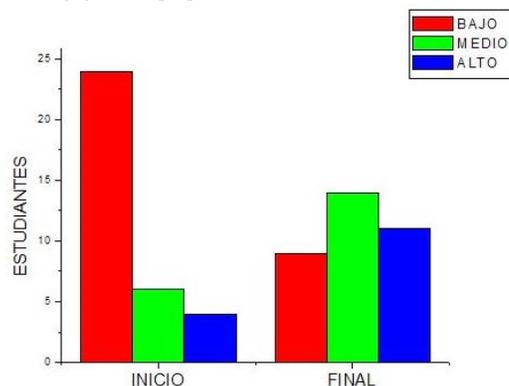


Figura 5. Expresa las ideas de forma clara y precisa tanto de manera oral como escrita.

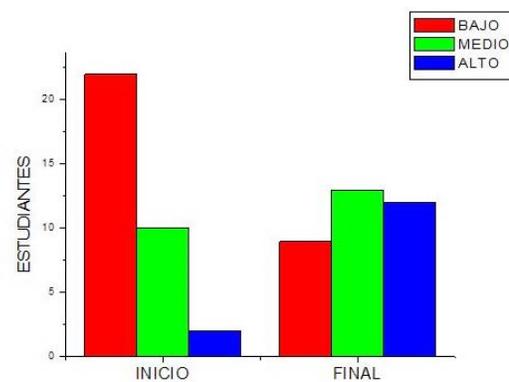


Figura 6. Presenta argumentos relacionados con el diseño propuesto.

En los estudiantes que realizaron las prácticas de laboratorios de forma tradicional no fueron apreciados avances significativos en las unidades de competencias analizadas y su motivación

por los laboratorios y la asignaturas continuaron siendo menores que la de los estudiantes que hicieron los L-P.

[1] P. Valdés, L. Piñol, M. Márquez; "Enriquecimiento del sistema de prácticas de laboratorio de Mecánica" IV Taller Iberoamericano de Enseñanza de la Física Universitaria (La Habana, 2007) 1-2.

[2] J. Flores, M. Caballero, M. Moreira; "El laboratorio en la enseñanza de las ciencias: Una visión integral en este complejo ambiente de aprendizaje". *Revista de Investigación* (2009) 75-111.

[3] E. Barolli, C. Laburú, V. Guridi; "Laboratorio didáctico de ciencias: caminos de investigación" *Revista Electrónica de Enseñanza de las Ciencias*. ISBN: 84788409 9 (1) (2010) 88-110. Revisada el 17 de enero 2013.

[4] J. Cruz; "Importancia de usar tecnología en el desarrollo de Prácticas de Laboratorio de Física Mecánica" *Revista Educación en Ingeniería*. ISSN 1900-8260 11 (2011) 1-11. Revisado el 13 de mayo de 2013.

[5] O. Jardey, A. Hurtado; "Laboratorios Didácticos de Física orientados a la formación de ingenieros" *Revista Argentina de Enseñanza de la Ingeniería* Año 2 N° 3 Marzo (2013) 7-24.

[6] J. Carrascosa, D. Gil-Pérez, A. Vilches P. Valdés; "Papel de la actividad experimental en la educación científica" *Cad. Bras.*

Ens. Fís 23(2) (ago 2006) 157-181.

[7] A. Freire; "Formación de habilidades experimentales en la Disciplina Física para Ingeniería Industrial" Tesis presentada en opción al título de Máster en Ciencias de la Educación (Santiago de Cuba, 1997) 23-30.

[8] D. Cuenca, J. Tamayo; "Estrategia para la Dinámica de las Habilidades experimentales de la Física para estudiantes de Ingeniería," V Taller Internacional sobre la enseñanza de la Física en Ingeniería. Instituto Superior Politécnico José Antonio Echeverría (La Habana, 2002) 12-15.

[9] J. Tamayo; "Sistema de modelos para el proceso docente educativo de la Física para estudiantes de Ingeniería", Informe al CITMA del proyecto de Investigación Pedagógica (Holguín, 2003) 25-35.

[10] Z. Baudilia de Jesús-Contreras; "Las Competencias Investigativas" *Pedagogía Profesional Universidad de Ciencias Pedagógicas "Héctor A. Pineda Zaldívar"* <http://www.pedagogiaprofesional.rimed.cu> ISSN 1684-5765 10(2) (abril-junio, 2012) 3. Revisado el 20 de mayo de 2013.

[11] H. Fuentes, E. Matos, L. Fuentes; "Experiencias en la formación de competencias profesionales en el diseño curricular desde una consideración humana." Ponencia presentada en, Universidad 2008, 6to Congreso Internacional de Educación Superior, Palacio de las Convenciones (La Habana, 2008) 7.

[12] J.A. Forgas Brioso, H. C. Fuentes, A. Fong Estopiñán, A. Ortega Cabrera, et. al. (Proyecto Forcom); "Las Competencias Profesionales: Un nuevo enfoque" Universidad Pedagógica "Frank País García" (Santiago de Cuba, 2005) 19-20.

LA SOCIEDAD CUBANA DE FÍSICA: CONTRIBUCIÓN A LA SUPERACIÓN DE PROFESORES UNIVERSITARIOS

THE CUBAN SOCIETY OF PHYSICS: ITS CONTRIBUTION TO THE UPGRADING OF UNIVERSITY PROFESSORS

S. L. GONZÁLEZ^{a†}, F. O. MACHÍN^b, Y R. ÁVILA^c

a) Departamento de Física-Química-Electrónica, Universidad de Holguín, Cuba; sgonzalez@ict.uho.edu.cu†

b) Departamento de Física-Química-Electrónica, Universidad de Holguín, Cuba; fmachin@facinf.uho.edu.cu

c) Departamento de Matemática-Infornática, Universidad de Holguín, Cuba; ravilaa@facinf.uho.edu.cu

† correspondign author.

PACS: History of science, 01.65.+g; physics education, 01.40.-d; teacher training, 01.40.gb

En los Centros de Educación Superior (CES) de la provincia de Holguín, han ingresado profesores de Física con poca experiencia en la dirección de los procesos sustantivos universitarios, declarados en los modelos de formación de profesionales de diferentes carreras. Los profesores de referencia se graduaron en Universidades de Ciencias Pedagógicas (UCP), y otros proceden de las carreras de Licenciatura en Física, Ingeniería Mecánica, Ingeniería Civil, Ingeniería en Telecomunicaciones y Electrónica e Ingeniería Industrial, por lo que su preparación profesional obedece a diferentes planes de estudios y perfiles.

Lo anterior limita el cumplimiento de las funciones profesionales pedagógicas, exigidas a claustros que deben desempeñarse con alto nivel profesional y científico. En especial, las limitaciones se manifiestan con mayor énfasis en el trabajo docente y metodológico, relacionado con la enseñanza de la Física Universitaria.

Un análisis detallado de las carencias que tuvieron en su formación los profesores de Física para la Secundaria Básica y Preuniversitario en las Universidades de Ciencias Pedagógicas, durante la década de los 90 del siglo XX, se presentó en un artículo precedente [1].

Entre los elementos que afectaron la enseñanza de la Física en la educación media en esa etapa histórica, en la cual se agudizó la crisis económica del país, se precisan:

- se puso en práctica la orientación de que los profesores de secundaria impartieran la mayoría de las asignaturas con el apoyo de clases grabadas para reproducir en videocasetas,
- se eliminó la realización de prácticas de laboratorio por parte de los alumnos y las demostraciones experimentales se presentaban por el televisor,

- la Física desapareció como asignatura independiente en la Secundaria Básica,
- se eliminó la prueba de ingreso de Física a las universidades en los Preuniversitarios.

No puede pasarse por alto que en esa etapa, más del 70% de los profesores de Física de la Educación Media abandonaron la labor docente [1].

En este artículo, a partir de la caracterización del estado actual que tiene la preparación profesional de una muestra del claustro de profesores universitarios de la provincia de Holguín, los autores proponen alternativas para la superación profesional de estos profesores, que han sido coordinadas por la Sociedad Cubana de Física (SCF), y valoran algunos resultados que se han obtenido con su puesta en práctica.

Se han publicado estudios sobre la formación de Ingenieros físicos en la etapa del 2007 al 2011 y licenciados en Física desde 1962, tanto en la Universidad de Oriente [2], como en la Universidad de La Habana [3]. En estos artículos se analizan los éxitos y resultados más significativos logrados en Cuba en la etapa posterior a la Reforma Universitaria de 1962, y también se valoran algunas limitaciones y barreras que se han manifestado en la evolución histórica de esas carreras. Extender los análisis a la formación de otros profesionales universitarios, le confiere actualidad al desarrollo de la enseñanza de la Física en Cuba.

El estudio preliminar de estos reportes, sirvió de orientación metodológica en la búsqueda de una propuesta que satisfaga las necesidades de superación de los profesores universitarios, que de un modo significativo impactan en la calidad de la enseñanza de la Física en las universidades holguineras. Es por eso que el Grupo Coordinador de la SCF en Holguín se proyectó por realizar actividades encaminadas al mejoramiento de la

preparación profesional de estos profesionales.

La SCF tiene entre sus objetivos, el de contribuir al desarrollo de la Física, su enseñanza y sus aplicaciones en Cuba y vincular entre sí y con la sociedad, a los físicos y a otros profesionales, promoviendo el desarrollo de los mismos.

Tomando estos objetivos como prioridades para proponer sus actividades, se promovió el diseño y ejecución de diferentes formas de superación profesional en coordinación con los CES de la provincia.

Se tuvo en cuenta una población de 25 profesionales de la Física, que se desempeñan en la Universidad de Holguín (UHo), en la UCP de Holguín, en el Ministerio de Educación (MINED) y en otras instituciones que forman parte del claustro a tiempo parcial de estas universidades. De esa población se escogió una muestra de 14 profesores universitarios (56%), de ellos, cuatro profesores de la UHo, cuatro de la UCP, dos del MINED y cuatro de otras instituciones que son profesores a tiempo parcial de la UHo.

Algunos elementos que caracterizan la preparación profesional de la muestra seleccionada, son los siguientes: ocho son graduados de Licenciatura en Educación en la especialidad de Física, cinco son graduados de carreras de ingeniería y uno es graduado de Profesor General Integral de Secundaria Básica; como promedio tienen 7,5 años de graduados; la composición de categorías docentes es de tres profesores auxiliares, dos asistentes, siete instructores, un auxiliar técnico de la docencia y uno que no está categorizado.

Además uno de ellos ostenta la categoría científica de investigador agregado; los 14 al menos han recibido un curso de superación; ocho tienen experiencia en la gestión de proyectos de investigación; cinco han participado en eventos nacionales e internacionales y tres tienen publicaciones en revistas referenciadas en bases de datos del grupo IV, reconocidas por el Ministerio de Educación Superior y la Comisión Nacional de Grados Científicos de la República de Cuba.

En cuanto a los intereses investigativos, se pudo precisar que aspiran a aportar resultados científicos en el campo de la Didáctica de la Física, en la educación energética para el desarrollo sostenible y en aplicaciones de la física en la técnica. En su preparación metodológica para enfrentar con éxito los programas de Física de la Educación Superior, hay una marcada diferencia de nivel, que favorece a los que proceden de la UCP y el MINED con respecto a los profesores de la UHo y de otras instituciones.

En correspondencia con las potencialidades y necesidades de los profesores seleccionados como muestra, la SCF ha asegurado el desarrollo de actividades encaminadas a favorecer su preparación profesional. Entre las actividades realizadas se destacan: la ejecución de seminarios científico metodológicos sobre temas de física y sus aplicaciones prácticas, conferencias

especializadas sobre temas actuales de la ciencia y la tecnología, talleres metodológicos para el perfeccionamiento de la enseñanza de la Física, tanto en la educación media como en las universidades y el desarrollo de eventos científicos, que incluyen: cursos, talleres, mesas redondas, debates científicos, paneles y simposios sobre temas afines.

Desde abril de 2013 comenzó un Diplomado de Física Universitaria y su Enseñanza en la Universidad de Holguín, que responde a las normativas del postgrado, especificadas en el Reglamento de la Educación de Postgrado en la República de Cuba. Se diseñaron tres módulos conectados entre sí, que incluyen aspectos de profundización en Matemáticas especiales, Física General, Física Teórica, el experimento físico, aspectos de la Didáctica y metodología de la enseñanza de la Física y se incluyeron aspectos de la Metodología de la investigación y relaciones Ciencia-Tecnología-Sociedad. Se ofrecen cursos y seminarios especiales que son opcionales en correspondencia con las líneas de investigación que desarrollan los participantes.

Este diplomado que aporta 27 créditos de postgrado, en su concepción apuesta por un posterior desarrollo en temas de maestría y doctorado, relacionados con las problemáticas reconocidas en sus intereses investigativos.

El claustro de profesores reúne los requisitos exigidos y está formado con profesores de la Universidad de Holguín y la Universidad de Ciencias Pedagógicas. Todos poseen el grado científico de Doctores en Especialidades de la física o en Ciencias Pedagógicas y ostentan las categorías docentes principales de Profesores Titulares o Profesores Auxiliares.

Se han realizado evaluaciones parciales y finales, con buenos resultados, que demuestran las transformaciones cualitativas y cuantitativas en los niveles de conocimientos, habilidades y valores de los profesores participantes. Se ha concebido la culminación del diplomado mediante variadas formas de presentación de los resultados científicos que avalen el desempeño profesional alcanzado.

En este artículo se significa la modesta contribución que está haciendo la SCF en el territorio holguinero, en función de elevar la calidad de la formación de los profesionales universitarios, centrando su atención en la preparación profesional y científica de profesores universitarios con menos experiencia y formación. Los resultados son alentadores y se aprecia motivación e interés, no solo de los que participan actualmente, sino de otros que aspiran a ingresar en próximas ediciones.

[1] E. Moltó, E. Altshuler, Rev. Cub. Fís. 30, 58 (2013).

[2] P. Muné, J.J. Guillarón, L. M. Méndez, Rev. Cub. Fís. 29, 2 (2012).

[3] O. de Melo, M. Sánchez-Colina, Rev. Cub. Fís. 29, 90 (2013).

EL REDUCCIONISMO EN LA ENSEÑANZA DE LA FÍSICA VERSUS EL PENSAMIENTO DE LA COMPLEJIDAD

THE REDUCTIONISM IN PHYSICS TEACHING VERSUS THE THOUGHT OF THE COMPLEXITY

D. DE J. ALAMINO

Centro Universitario Municipal "Enrique Rodríguez-Loeches". Universidad de Matanzas, Cuba; diego.alamio@umcc.cu.

Key words: teaching methods and strategies 01.40.gb, history of science 01.65.+g, philosophy of science 01.70.+w

Las incertidumbres, la impredecibilidad, las limitaciones en el conocimiento, han acompañado al hombre desde los albores de la humanidad. Poincaré a finales del siglo XIX advirtió que el simple hecho de pasar del estudio del movimiento de dos cuerpos, por ejemplo Tierra-Luna, a considerar el sistema Sol-Tierra-Luna, hacía que las ecuaciones de Newton no tuvieran una solución exacta [1]. La Mecánica Cuántica, mostró desde dentro de la propia física, la fragilidad del determinismo mecanicista.

El mundo actual, se revela como complejo y hasta en los sistemas más reducidos que se logren delimitar para su estudio, existen partes interconectadas cuyos vínculos pueden dar lugar a emergencias no predecibles a partir del comportamiento de sus partes.

¿Estará la escuela en el camino de lograr presentar al mundo como complejo? ¿Podrá la escuela rebasar la posición positivista y cartesiana de presentar al mundo fragmentado en muchas partes separadas entre sí? Sagan, en "El mundo y sus demonios" valoró que "la enseñanza de la ciencia se hace demasiado a menudo de manera incompetente o poco inspiradora y sus practicantes... tienen poca preparación o ninguna en los temas que presentan" [2]. También se han adelantado ideas por Edgar Morin [3,4]. Valdés y colaboradores han expresado que: "con frecuencia se antepone la mera transmisión a los estudiantes de conocimientos ya preparados –a veces demasiado específicos, o desactualizados– y el desarrollo de habilidades excesivamente particulares" [5].

En el trabajo se pretende advertir acerca de manifestaciones reduccionistas que se presentan en la enseñanza de la Física, y que pueden limitar en los estudiantes el desarrollo del pensamiento de la complejidad, significando en algunos momentos lo que el tratamiento histórico filosófico de los contenidos puede contribuir a menguar esta limitación.

Reducir, constituye en el plano ontológico-epistemológico una forma simple, sencilla de concebir la diversidad y complejidad de la realidad [6]. La reducción, como procedimiento

metodológico, consiste en dar a algunos datos o tareas una forma cómoda para su análisis o solución, así como en llevar lo complejo a algo más simple. Conviene advertir que la palabra reduccionismo se usa a menudo de modo poco preciso, refiriéndose a veces a los constituyentes de la materia (ontológico), otras al método con que debemos investigar (metodológico), en ocasiones a la posibilidad de deducir una ciencia de otra de un nivel de complejidad menor (epistemológico) [7]

El estudio de la física en la escuela empieza por el movimiento mecánico, y desde la primera clase se reduce el estudio del movimiento de un cuerpo macroscópico al movimiento de una partícula "sin dimensiones", pero con masa; solo cuando hay que estudiar la rotación se tienen en cuenta las dimensiones del cuerpo, con la restricción de que ese cuerpo sea un "sólido rígido", compuesto por partículas que no cambian sus distancias mutuas. Las cuerdas que atan a los cuerpos se consideran que son inextensibles y no poseen masa. El péndulo, se presenta como un cuerpo puntual, sostenido por un hilo inextensible y sin masa, si se pone a oscilar estará en movimiento indefinidamente y no cambiará su plano de oscilación por el efecto de la rotación de la Tierra.

En Mecánica no deja de estudiarse el movimiento planetario con las leyes de Kepler, las cuales históricamente son el resultado de la observación minuciosa y el ajuste a los datos de Ticho Brahe. El movimiento de proyectiles se reduce en su estudio a dos dimensiones y se presenta desprovisto de la fricción y velocidad del viento. ¿Cuántas perturbaciones pueden afectar este movimiento? Por ejemplo cuando la instalación de los cohetes soviéticos en Cuba, durante la Crisis de Octubre en el año 1962, fue necesario "determinar la aceleración de la fuerza de gravedad y los valores de las desviaciones de la línea vertical respecto a la normal en cada punto de lanzamiento"^a.

El movimiento de los fluidos en la enseñanza de la física se hace atendiendo a líquidos incompresibles, no viscosos y se llega a las ecuaciones de continuidad y Bernoulli que pueden

ser confrontadas con la práctica en demostraciones escolares con cierta precisión.

El tratamiento reduccionista se hace incuestionable cuando se estudian los fenómenos en los gases, ya sea con el enfoque macroscópico de la Termodinámica o desde el punto de vista de la Teoría Cinético Molecular, en este caso como se aborda el movimiento mecánico, se consideran a los constituyentes del gas como partículas sin dimensiones, que no interactúan a no ser cuando chocan entre sí o con las paredes del recipiente que las contenga. La ecuación que maneja la Termodinámica justifica su validez para el caso de bajas presiones.

Atendiendo a otra de las formas de movimiento de la materia, la Física en la escuela, estudia el electromagnetismo, apareciendo el concepto de "carga puntual", que carece de dimensiones, pero posee carga eléctrica y en algunos casos, como en la electrostática, se obvia la masa, dada la superior fortaleza de la interacción electrostática ante la gravitatoria.

Otros muchos casos de simplificaciones se hacen al exponer la física en la escuela y se acostumbra a entrenar a los estudiantes para que resuelvan los problemas de lápiz y papel y contesten a las preguntas, sobre la base de estas simplificaciones, sin promover el pensamiento crítico, lo cual no contribuye a preparar al estudiante para enfrentar las incertidumbres con que necesariamente habrá de encontrarse, no solo dentro de la física, sino para intentar comprender y transformar el mundo y no resultar solo fuerza calificada, destinada al mercado del trabajo [8]

Los procedimientos empleados en la enseñanza de la física están acorde a las representaciones simplificadas que tradicionalmente se han realizado con el propósito didáctico de acercar fenómenos complejos a la comprensión de los estudiantes, pero esto no debe coartar que se revelen las limitaciones de estos procedimientos, y aquí cabe considerar lo que Matthews recomienda: "la historia y la filosofía de la ciencia pueden hacer las clases más desafiantes y reflexivas y así incrementar las habilidades del pensamiento crítico; puede contribuir a la completa comprensión de la materia científica de estudio, puede además contribuir en algo a vencer el 'mar de sinsentido' [...] donde fórmulas y ecuaciones son recitadas pero pocos conocen lo que ellas significan; puede mejorar la preparación de los profesores mediante la ayuda al desarrollo de una más rica y más auténtica epistemología, lo cual significa una mayor comprensión de la estructura de la ciencia y su lugar en el esquema intelectual de cosas" [9]

La enseñanza de la física desprovista de historia y filosofía puede conducir a lamentables deslices, por ejemplo: pensar que Newton descubrió la Ley de Gravitación Universal cuando observó la caída de una manzana o en el caso de algunos

profesores de física que piensan que la primera ley de Newton es fácilmente comprendida por los estudiantes, debido a que ellos la "recitan". La historia de la ciencia revela que fueron necesarios 1800 años para la completa formulación de esta ley [10]. La fundamentación de la primera ley solo es posible por medio de la historia de la física porque en la experiencia de la vida diaria el movimiento rectilíneo y uniforme no puede ser observado.

Las teorías desarrolladas por Copérnico, Tycho Brahe, Kepler, Galileo, Newton, y otros, explicaron muchos fenómenos a través de leyes simples. Estos impresionantes logros generaron una confianza inmensa en el conocimiento objetivo y el reconocimiento de un universo gobernado por leyes simples y de gran alcance. Hoy hay pocos científicos identificados con estas ideas que pretendan comprender todas las cosas y cada una de sus partes a través de la relación lineal causa-efecto [11]. Estas posiciones, deben ser transmitidas a los estudiantes en el proceso de enseñanza-aprendizaje mediante el empleo de la historia y la filosofía de la física, para evitar la tendencia al pensamiento absolutizador, tan frecuente en los jóvenes [12]. Aunque el avance de la ciencia ha hecho creer que se está muy cercano de una teoría final, nunca sabremos si realmente hemos llegado. William Thomson en 1905 declaró: "No existe nada nuevo que descubrir ahora en la física; la única cosa que queda es hacer mediciones más precisas" [13], lo que muy pronto fue negado por la Teoría de la Relatividad y la Mecánica Cuántica.

El avance de la física ha destruido viejos conceptos y ha dado origen a otros. El tiempo absoluto y los sistemas inerciales de referencia han sido abandonados, por la Teoría de la Relatividad; en la Teoría Cuántica, la continuidad fue remplazada por la discontinuidad y aparecieron las leyes probabilísticas. La enseñanza de la física tiene que preparar a los estudiantes para enfrentar estos retos. El empleo de la historia y la filosofía de la física es un importante recurso didáctico para conducir a los estudiantes hacia la profunda comprensión de la física, su evolución, estructura, teorías, leyes, hechos y conceptos. Finalmente, es importante significar que hoy: el conocimiento analítico, disciplinar, lineal, no está revelando el comportamiento de la realidad objetiva, por lo que se impone el pensamiento holístico, transdisciplinar y no lineal.

[1] Sardar, Z. and Abrams, I. *Introducing Chaos*, Icon Books Ltd, Cambridge, UK, 1999.

[2] Hacyan, S. *Cuando la ciencia nos alcance II*, Fondo de Cultura Económica, México DF, 2002.

[3] Morin, E. "Los siete saberes necesarios a la educación del futuro", UNESCO, 1999.

[4] Morin, E. "La cabeza bien puesta: Repensar la reforma, Reformar el pensamiento", Ediciones Nueva Visión; Buenos Aires, 2002.

[5] Valdés, P, et al, *Enseñanza de la Física Elemental*, Editorial Pueblo y Educación, La Habana 2002.

- [6] Guadarrama, P. "Crítica a los reduccionismos epistemológicos en las ciencias sociales" Revista de Filosofía, vol. 27, No. 62, 2009.
- [7] Fernández-Rañada, A. Reduccionismo, objetividad, paradigmas y otras cosas de la ciencia, Ciencia No. 85 enero 2004.
- [8] Betto, F. Educación crítica y protagonismo cooperativo, Conferencia Congreso Pedagogía 2015, La Habana
- [9] Matthews, M. History, Philosophy, and Science Teaching: The Present Rapprochement. Science and Education 1,11-47, 1992.
- [10] Koyré, A. Estudios de historia del pensamiento científico, Siglo XXI, Editores sa de cv, México, DF, 1988.
- [11] Markarian, R. y Gambini, R. Editores, Ediciones Trilce, Montevideo, 1997.
- [12] García, F. Presente y futuro del científico, Lección inaugural del Curso Académico 1996-1997, Universitat Jaume I, Castellón de la Plana, 25 de septiembre 1996.
- [13] Claro, F. A la sombra del asombro: El mundo visto por la física, Editorial Andrés Bello, Santiago de Chile, 1995.

TAREAS INTEGRADORAS PARA POTENCIAR LAS RELACIONES INTERDISCIPLINARIAS ENTRE LAS ASIGNATURAS FÍSICA Y MATEMÁTICA EN DÉCIMO GRADO

INCLUSIVE WORK TO ENHANCE THE INTERDISCIPLINARY RELATIONS BETWEEN PHYSICS AND MATHEMATICS SUBJECTS IN TENTH GRADE

Y. MARZO^{a†}, M. MURAMATSU^b, J. GILLARÓN^c, G. MORENO^a, S. GONZÁLEZ^d, E. SÁNCHEZ^a

a) Departamento de Física, Instituto Superior Minero Metalúrgico de Moa, Cuba; ymarzo@ismm.edu.cu†

b) Instituto de Física, USP, Brasil

c) Departamento de Física, Universidad de Oriente, Cuba

d) Universidad de Holguín, Cuba

† autor para la correspondencia.

Palabrasclaves: IntegrativeTasks(01.40.Ha), Interdisciplinaryphysics(89.90.+n), Physicseducation, (01.40.-d), Teachingmethods, (01.40.gb)

La Matemática y la Física tienen su idioma y sus notaciones propias. Para asegurar la comprensión de sus enseñanzas, es imprescindible que los profesores de ambas disciplinas expliquen cómo sus lenguajes se relacionan entre sí.

Al proceso de búsqueda continua de los puntos de contactos entre las asignaturas se le reconoce con el nombre de relaciones interdisciplinarias.

El concepto de interdisciplinariedad abarca no solo los nexos que se pueden emplear entre los sistemas de conocimientos entre una disciplina y otra, sino también aquellos vínculos que

se pueden crear entre los modos de actuación, formas de pensar, cualidades, valores y puntos de vista que potencian las diferentes asignaturas. Enriquece sus marcos conceptuales, sus procedimientos, sus metodologías de enseñanza y de investigación [1, 2, 3, 4].

Algunas de las principales barreras en el trabajo interdisciplinario se relacionan con la falta de un lenguaje común, el egocentrismo intelectual que impone cada disciplina como algo prioritario, las estructuras institucionales existentes y procedimientos establecidos; la falta de una concepción sistémica y sistemática de la complejidad de los distintos saberes y problemas, y la reticencia a reconocer que más que una ciencia blanda y superficial, la interdisciplina permite fortalecer las disciplinas por el abordaje de los problemas desde perspectivas diferentes, y es un medio para construir una sociedad más justa y humana [5].

De todos los estudios realizados sobre este tema se desprende,

que todavía existe una gran distancia entre la enseñanza que se efectúa y las necesidades de los profesionales y estudiantes. Las conclusiones arribadas después de revisar documentos, visitas a clases y preparaciones metodológicas se detectó que las tareas observadas en la enseñanza de la Física presentan un carácter poco integrador a pesar de las potencialidades que posee esta para el cumplimiento del Programa Director de la Matemática (PDM), impidiendo con ello respuestas de tareas completas. La anterior situación afecta la implicación del estudiante en la solución de las tareas asignadas dejándole poco espacio a que el estudiante sepa aplicar contenidos matemáticos ya recibidos en la asignatura de Física.

Por otra parte tampoco se aprovechan las oportunidades que ofrecen las preparaciones metodológicas en los colectivos departamentales, para realizar debates profesionales relacionados con el programa, y con la forma de cumplir los objetivos propuestos en cada asignatura, impidiendo con ello hallar los nexos entre las asignaturas Física y Matemática, lo que dificulta el logro de la unidad de criterios por parte de los profesores para impartir el contenido con la misma terminología.

En el programa director de Matemática se plantea: «la enseñanza de la Matemática es imprescindible en la formación integral de cualquier persona, sus contenidos básicos son decisivos para lograr un aprendizaje significativo sólido y apreciable, ya sea en la vida cotidiana como en el desempeño profesional [6].

En correspondencia con lo antes expuesto se elabora un conjunto de tareas integradoras que favorezca el aprendizaje

de la asignatura Matemática a partir de las potencialidades que ofrecen los contenidos del programa de la asignatura Física en décimo grado y deben transitar por las siguientes etapas:

La primera etapa consiste en la aplicación del diagnóstico, es necesario el dominio por parte de los profesores del departamento de los conocimientos precedentes del contenido que se desea impartir.

La segunda etapa en determinar los nexos esenciales de las asignaturas Física y Matemática.

La tercera etapa consiste en la elaboración de un conjunto de tareas integradoras.

La cuarta etapa consiste en la socialización de la propuesta de tareas integradoras en el colectivo de profesores del Departamento de Ciencias.

La quinta etapa es la instrumentación de las tareas integradoras en la práctica pedagógica.

Las tareas integradoras propuestas:

1-Dos turistas se dirigen simultáneamente a una ciudad que se encuentra a una distancia de 30 km de ellos. El corre por hora 1 km más que el segundo, por lo cual llega a la ciudad 1 h antes. ¿Cuántos kilómetros por hora recorre cada turista?

2-Un automóvil sale de una ciudad A hacia otra B a una velocidad de 80 km/h; al mismo tiempo sale un ómnibus de B hacia A con una velocidad de 65 km/h. Si la distancia entre A y B es de 435 km.

a) ¿Cuánto tiempo tardarán en encontrarse?

b) ¿A qué distancia de B se encontrarán?

3-Dos autos parten desde dos ciudades A y B que distan 50 km. Los autos viajan al encuentro por una carretera rectilínea con una velocidad de 10 km/h y el otro a 20 km/h.

a) Construya la gráfica de $x = f(t)$ del primer auto.

b) Construya la gráfica de $v = f(t)$ de los dos autos.

c) A partir de las gráficas determine el desplazamiento de los dos autos.

d) ¿Al cabo de qué tiempo se cruzan los autos?

4-A partir de la gráfica de $v = f(t)$ de la figura 1, que representa el movimiento de tres cuerpos responda:

a) ¿Qué valor posee la velocidad de cada cuerpo para $t=0$?

b) Calcule el desplazamiento de los cuerpos 2 y 3 hasta detenerse.

c) Calcule el desplazamiento experimentado por el cuerpo 1 hasta que el cuerpo 2 se detiene.

d) Escriba las ecuaciones de los movimientos de la forma $y=mx+ n$.

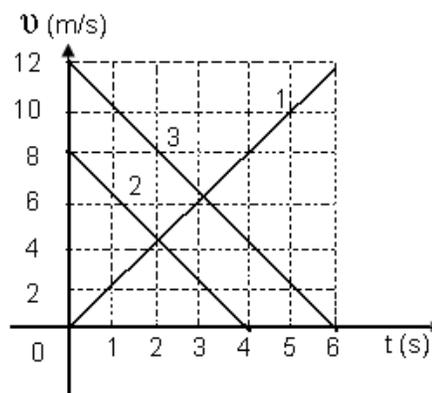


Figura 1: Movimiento de tres cuerpos.

A continuación se muestra ejemplos de la forma en que se puede abordar la solución de estos ejercicios.

Tabla I			
Datos del problema 1			
	s	v	t
Turista 1	30	30/x	x
Turista 2	30	30/(x+1)	x+1

Solución del 1:

$$\frac{30}{x} - \frac{30}{x+1} = 1$$

$$30(x+1) - 30x = x(x+1)$$

$$30x + 30 - 30x = x^2 + 1$$

$$x^2 + x - 30 = 0$$

$$(x+6)(x-5) = 0$$

$$x_1 = -6 \quad x_2 = 5$$

En la tarea 4, inciso d) es parecida a las que se trabajan en clase, la diferencia está en la terminología que empleen los profesores de Física y Matemática para explicarlos.

Para evaluar la efectividad de la propuesta se aplicó la metodología preexperimental, seleccionando para ello 2 grupos enteros, uno de control y el otro experimental, de forma tal que se pudieran validar el estado inicial y final.

Como variable independiente se consideró el sistema de tareas integradoras y la variable dependiente integración de

los contenidos de las asignaturas, se utilizaron los indicadores: Calidad de la aplicación de conocimientos matemáticos en la solución de tareas desde la asignatura Física y resultados académicos.

Matemática	Física
$y = mx + n$	$\vec{v} = \vec{v}_0 + \vec{a}t$
$m > 0$ creciente	$\Delta v > 0$ MRUA
$m < 0$ decreciente	$\Delta v < 0$ MRUR
$m = 0$ constante	$\Delta v = 0$ MRU $v \rightarrow cte \quad a = 0$
$m = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1}$	$a = \frac{v_2 - v_1}{t_2 - t_1}$

Los grupos seleccionados para el experimento contaron con una matrícula de 30 estudiantes y se evaluaron los resultados en el curso 2012-2013, en el preuniversitario mixto del municipio Moa.

Los resultados obtenidos en el grupo experimental muestran mayor calidad en los resultados de promoción que los del grupo de control, se constató en los diagnósticos aplicados.

La elaboración de tareas integradoras constituye una vía fundamental para potenciar las relaciones interdisciplinarias entre las asignaturas Física y Matemática, ya que las mismas permiten alcanzar un pleno dominio del aparato conceptual de la Física y de los recursos matemáticos necesarios para la aplicación de estos conocimientos.

El preexperimento pedagógico aplicado demostró la significación práctica y el nivel de factibilidad que tienen las tareas integradoras para contribuir adecuadamente a la formación matemática en los estudiantes a través del proceso de enseñanza-aprendizaje de la asignatura Física en décimo grado.

[1] J. Fiallo, "Las relaciones intermaterias. Una vía para incrementar la calidad de la educación", Ed. (Pueblo y Educación, La Habana, 2001), pp. 28-48.

[2] R. Velázquez, "El perfeccionamiento del modo de actuación Interdisciplinario en docente del Área de Ciencias Naturales de la enseñanza Preuniversitaria". Tesis de doctorado, ISP de Holguín, 2005.

[3] F. Perera, "Práctica de la interdisciplinariedad en el proceso de enseñanza-aprendizaje", (Ed. Pueblo y Educación, La Habana, 2007), pp. 3-6.

[4] M. Soler, "La interdisciplinariedad en el proceso de enseñanza- aprendizaje de la República de Cuba". Tesis de doctorado, ISP de La Habana, 2012.

[5] Y. Carvajal, Luna Azul. Rev. ISSN 1909-2474 No. 31, julio-diciembre (2010), Universidad de Caldas.

[6] S. Bravo, M. González, V. Reyes, Varela. Rev. Vol.2-Nro 29-2011. Mayo - Agosto. ISSN 1810-3413

DETERMINACIÓN DE DEXTRANA EN AZÚCARES TÉCNICOS MEDIANTE EL SISTEMA CROMA-TOGRÁFICO CON DETECCIÓN POLARIMÉTRICA SCDP

DEXTRAN DETERMINATION IN TECHNICAL SUGARS USING A CHROMATOGRAPHIC SYSTEM WITH AUTOMATIC POLARIMETRIC DETECTION SCDP

S. NARANJO^{†a}, V. FAJER^a Y C. W. RODRÍGUEZ^a

a) Centro de Aplicaciones Tecnológicas y Desarrollo Nuclear (CEADEN); naranjo@ceaden.edu.cu, vfajer@infomed.sld.cu.

[†] corresponding author.

Palabras claves: Laser applications of 42.62.-b, chromatography 82.80Bg, polarimeters 7.60Fs.

La concentración de dextrana es un importante indicador de la calidad de los azúcares técnicos que está regulado a nivel internacional. El método aprobado actualmente para este control por parte de la ICUMSA requiere del uso de espectrofotómetros u otros instrumentos. En el presente trabajo se discute el desarrollo de un método que combina la cromatografía líquida con un polarímetro automático como detector. Se prepararon patrones utilizando Dextrana 110 kDa para obtener la curva de calibración del sistema correspondiente con concentraciones de 50, 100, 200, 300, 400, 500, 600, 700 y 800 PPM. Se detectó la presencia de, al menos, tres picos en la zona de alta y mediana masa molar. Los resultados preliminares muestran la posibilidad de utilizar este método para la determinación de la concentración de dextrana en los laboratorios azucareros aunque resulta necesario mejorar la sensibilidad del sistema.

Dextran concentration is a very important quality indicator of technical sugars which is regulated at international level. The only method approved by ICUMSA requires spectrophotometer or some other equipment. In this paper it is discussed the development of a method combining liquid chromatography with an automatic polarimetric detector. Standard solutions having 50, 100, 200, 300, 400, 500, 600, 700, 800 ppm, using analytical grade dextran (110 kDa), from Amersham, were prepared to obtain a calibration curve. Chromatograms of technical sugars showed three peaks, well defined, in high and medium molar mass zones. Preliminary results indicate the possibility to determine dextran concentration in sugar mill laboratories using this method, even though sensibility can be improved.

INTRODUCCION

El contenido de dextrana es uno de los parámetros principales de la calidad del azúcar crudo destinado a la refinería. Su concentración está sujeta a regulaciones internacionales. El único método aprobado por ICUMSA para determinar el contenido de dextrana en azúcar crudo es el turbidimétrico, el cual está basado en su poca solubilidad en solución hidrotanólica, y medición espectrofotométrica a 720 nm de la turbiedad producida [1,2].

Se muestran los resultados obtenidos con el empleo de la cromatografía líquida de baja presión acoplada a un detector polarimétrico láser [3-6] y la cuantificación de dextrana en muestras de azúcar crudo mediante la comparación del valor en grados angulares de los picos obtenidos en el cromatograma con una curva de calibración confeccionada con patrones de dextrana de 110 kDa.

MATERIALES Y METODOS

El sistema de separación utilizado está constituido por dos columnas de acrílico con 150 y 300 ±0,2 mm de longitud y 25 mm ±0,1 mm de diámetro interior, interconectadas y

empaquetadas con geles Sephadex G-10 (límite de exclusión 0,7 kDa) y G-50 (límite de exclusión 10 kDa), respectivamente [4,5].

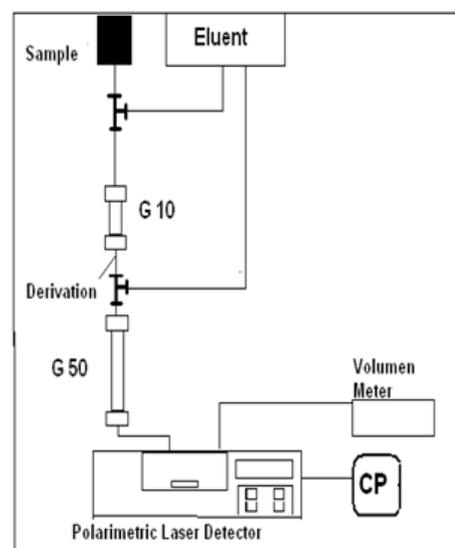


Figura 1: Sistema cromatográfico con detección polarimétrica (SCDP).

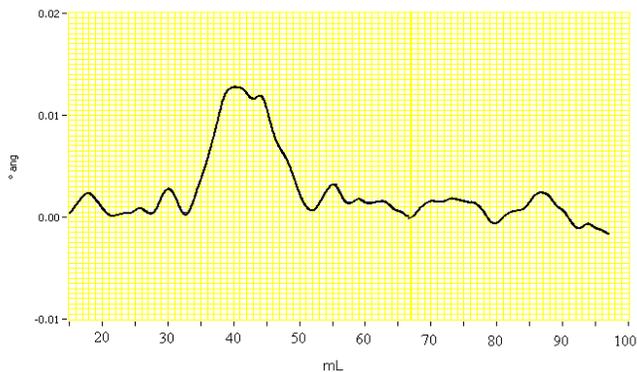


Figura 2. Patrón de dextrana (110 kDa) 100 ppm.

Se prepararon patrones utilizando Dextrana 110 para obtener la curva de calibración correspondiente equivalentes a 50, 100, 200, 300, 400, 500, 600, 700 y 800 PPM.

CURVA DE CALIBRACIÓN DE LA DEXTRANA

Un patrón primario de 10000 ppm fue preparado utilizando Dextrana (masa molar 110 kDa) con patrones secundarios desde 50 hasta 800 ppm (0.005% a 0.08% g/100mL p/v). Se cromatografiaron 10 mL de estos patrones secundarios por triplicado y los valores de los picos promediados para obtener la curva de calibración correspondiente.

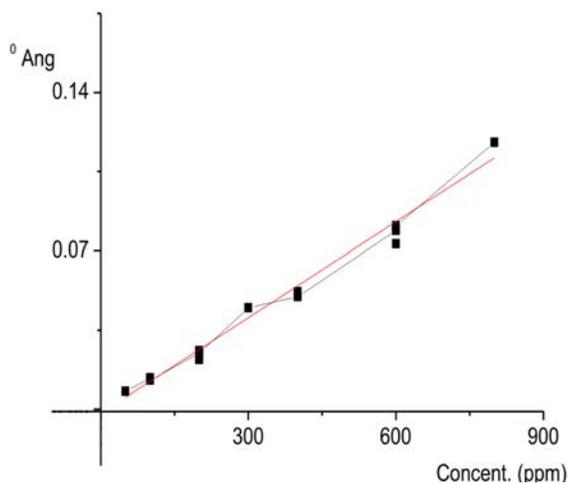


Figura. 3 Curva de calibración de la dextrana

RESULTADOS CON MUESTRAS DE AZÚCAR CRUDO

En el cromatograma de la muestra de azúcar crudo analizada se observa la presencia de dos máximos relativos en la zona de alta masa molar (37 y 42/44 mL de elución) que corresponden a polímeros que fueron excluidos de Sephadex G-50 por tener masas molares mayores de 10kDa, así como otro, a los 52/55 mL, que resultó excluido de G-10, pero no de G-50, que lo identifica como de mediana masa molecular, es decir, mayor de 0,7kDa pero menor de 10kDa, eluyendo antes que los carbohidratos de baja masa molecular (glucosa, fructosa, sacarosa, etc.)

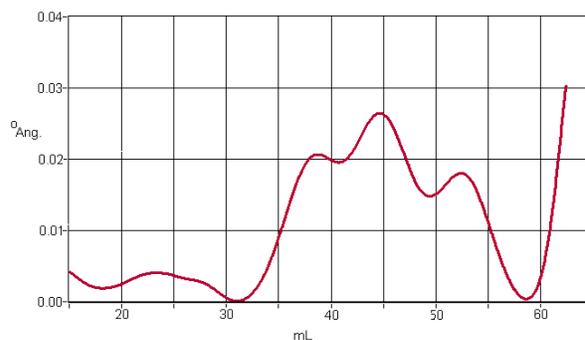


Figura 4. Cromatograma obtenido después de ajustar la solución a pH 8, sin aplicar clarificación

En los cromatogramas de la dextrana utilizada como patrón, se aprecia que, en todos los casos, el máximo aparece a los 42/44 mL, lo cual permite deducir que las muestras de azúcar crudo pudieran contener dextranas de alta y muy alta masa molar.

CONCLUSIONES

El método descrito permite la determinación de la concentración de dextrana a través de la medición de la altura de los picos de los cromatogramas, en azúcares técnicos con un nivel de sensibilidad por debajo de los 200 ppm susceptible de mejorarse. Esto constituye un método factible de utilizarse en los laboratorios de los centrales azucareros que empleen polarímetros cubanos de la serie LASERPOL.

AGRADECIMIENTOS

Se agradece la valiosa colaboración de los miembros del Grupo de Polarimetría del CEADEN, del laboratorio de técnicas analíticas del ICIDCA y del laboratorio del central Urbano Noris.

- [1] F. H. Pérez Sanfiel y F. Fernández Álvarez (2006) Métodos Analíticos para Azúcar Crudo. (ICINAZ). ISBN 959-7140-18-7 Publicac. Azucareras, La Habana, Cuba. 209 pp.
- [2] Earl J. Roberts. (1982) A Quantitative Method for Dextran Analysis. INTERNATIONAL COMMISSION FOR UNIFORM METHODS OF SUGAR ANALYSIS (ICUMSA) Procedure 1982 Meeting, New Orleans, Louisiana, E.U pp116-122.
- [3] V. Fajer, N. Duarte, J. C. López; R. Torres, T. Colomé, A. Combarro, J. L. Díaz.. 1998). Electronic polarimeter. U K patent. GB2286244A.
- [4] V. Fajer. C. W. Rodríguez, T. Cepero, S. Naranjo, E. Arista, W. Mora, G. Mesa, H. Fernández, J. Arteché. y G. Cossío. (2008) Sistema Automatizado de Cromatografía Líquida con Detección Polarimétrica Láser y Aplicaciones. Rev. Cub. Física vol. 25 No. 2.
- [5] C. W. Rodríguez, T. Cepero, V. Fajer, S. Naranjo, W. Mora, E. Arista, G. Mesa, H. Fernández y D. Piñón (2009) Chromatographic Automatic System with Laser Polarimetric Detection Technique for Estimating Real Sucrose in Sugarcane. Sugar Technology No.: 11 (4) pp 392-394.

[6] V.Fajer, C. W. Rodríguez, S. Naranjo, H. Fernández, W. Mora, T. Cepero, E. Arista, G. Mesa, G. Cossío, J. Arteché y C. Fonfría. (2010) Chromatography automatic system with optical activity laser detector and its applications. Sugar Technology Vol 12 No.:3.

[7] S.Naranjo, T.Cepero, V. Fajer, C.W.Rodríguez, W. Mora, E. Arista, H..Fernández, G.Mesa. y G. Cossío. (2006) Application of a Flow System with Laser Polarimetric Automatic Detection for Molecular Exclusion Chromatography of Carbohydrates. Sugar Technology 8 (2&3):23-26, 2006.

TEMPERATURE DEPENDENT SEEDING EFFECTS ON HYDROTHERMALLY GROWN ZINC OXIDE NANORODS: TOWARDS LOW TEMPERATURES AND HIGH SCALABILITY

EFFECTOS DE LA TEMPERATURA DE SEDIMENTACIÓN EN NANORODS DE ÓXIDO DE ZINC CRECIDOS POR CBD

L. VAILLANT-ROCA^{a,b,†}, A. PEUKERT^{b,c}, M. WITTMER^{b,d}, O. ALMORA^d, A. CHANAWEA^{b,c,e} Y E. VON HAUFF^{b,c,e}

a) ENERMAT Division, Institute of Materials Science & Technology (IMRE) – Physics Faculty, University of Havana, Havana, Cuba; vaillant@fisica.uh.cu†.

b) Organic Photovoltaics & Electronics, Institute of Physics, University of Freiburg, Freiburg, Germany.

c) Freiburger Materialforschungszentrum (FMF), University of Freiburg, Freiburg, Germany.

d) Department of Physics, Higher Polytechnic Institute Jose A. Echeverría (ISPJAE); Havana, Cuba.

e) Fraunhofer Institute for Solar Energy Systems (ISE), Freiburg, Germany.

PACS: 81.07.Bc Nanocrystalline materials, 81.16.Be Chemical synthesis methods, 61.46.Km Structure of nanowires and nanorods.

Zinc oxide has been widely recognized for its extensive functionality and versatility in electronic and opto-electronic applications [1,2,3]. Recently nanostructured metal oxides have gained increasing interest for use in novel photovoltaic devices, such as dye sensitized (DSSC), organic (OSC) and hybrid solar cells (HSC) [4,5,6]. ZnO, a wide band gap semiconductor, does not contribute to the absorption of light in the solar cell active layer but can be combined with other thin film absorber materials, to form active heterojunctions. In contrast to more conventional homojunction photovoltaic devices, carriers are photogenerated in the absorber and subsequently separated at the extended hybrid interface and finally transported out of the device via the separate material phases. The most commonly investigated form of nanostructure for hybrid solar cells are vertically aligned nanorods [5] which form an ordered, penetrating network with the absorber material, extending from the active layer to the electrode for efficient charge transport and collection. In this study we apply a two-step process to produce ZnO nanorods by chemical bath deposition technique (CBD). The first step, called seeding, refers to the creation, generally by spin coating, of a seed layer for promoting the nucleation on the substrate. We examine the influence of thermal annealing on seeding and in nanorods morphology by varying the seeding temperature from room temperature (RT) to 500°C. We also investigate the effects of changing deposition cycles [1 – 10], thereby varying seed layer coverage on the substrate.

For the fabrication of ZnO seeds, a 2.5 mM solution of zinc acetate (Merck) in ethanol was prepared following the approach used in [7]. Fig. 1 shows AFM pictures of seed layers formed by spin coating the zinc acetate solution 5 times on top of glass substrates and thermally treating the samples from 250°C to 500°C.

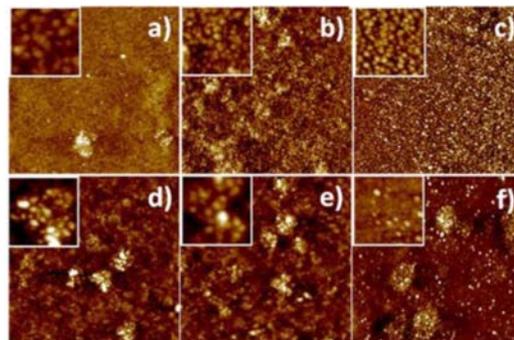


Figure 1. AFM images of seed layers annealed at a) 250°C, b) 300°C, c) 350°C, d) 400°C, e) 450°C and f) 500°C on top of glass substrates. The large images have scan dimensions of 1 μm and the insets have scan dimensions of 125 nm.

Features can be observed on the samples which evolve from homogeneous distributions to large clusters as temperature increases. This demonstrates the coalescence of particles into islands suggesting a thermally activated diffusion and nucleation process. The sample treated at 350°C shows the most uniform particle size distribution. At higher temperatures the formation of agglomerates can be seen, which may induce disorder for nanorod growth.

SEM images of nanorods grown on prepared seed layers can be observed in Fig. 2.

The nanorods were obtained by placing the seeded substrates in a solution prepared as reported in [8] using a 1:1 ratio of zinc nitrate and hexamethylenetetramine (HMT) as precursors at a temperature of 80°C for 60 min. The nanorods were grown under the same CBD conditions to ensure that only the seeding process influences the morphology. As can be seen in

figure 2, varying the annealing temperature of the seed layer does not appear to strongly influence the dimensions of the nanorods, which are roughly 500 nm long and 60 – 90 nm wide, indicating that these are primarily influenced by the CBD parameters. The distribution and relative orientation of the nanorods, however, are observed to depend on the annealing temperature used to prepare the seed layer. The distribution of nanorods on the substrate is found to be most homogenous for seed annealing temperatures between 300°C and 400°C. This correlates with the increased homogeneity of the seed size distribution observed from the AFM measurements at these temperatures (fig. 1). At temperatures above 400 °C we observe clustering of ZnO nanorods surrounded by bare substrate corresponding to the seed agglomerates occurring at higher annealing temperatures.

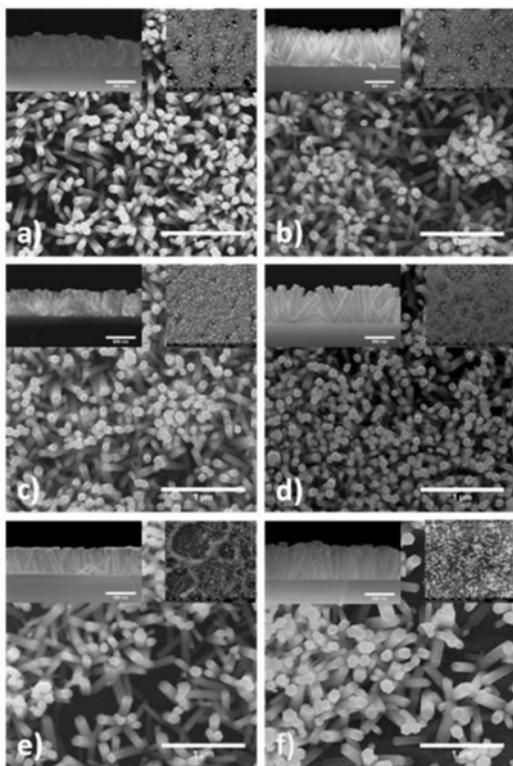


Figure 2: SEM images of ZnO nanorods grown on seed layers on glass annealed at a) 250°C, b) 300 °C, c) 350°C, d) 400°C, e) 450°C and f) 500°C. On the insets transversal and magnified view.

To verify the influence of the seeds on nanorod orientation, we took XRD spectra of the samples. The 002 peak is most prominent for all the samples, and together with the 003 peak is consistent with ZnO nanorods which grow perpendicularly from the substrate along the c-axis. The relative intensity of the 002 peak to other peaks associated with crystal growth along other axes (100, 101) can be used as an indicator for nanorod orientation. These values are summarized in table 1 for nanorods grown on the different seed layers showing that

the most highly oriented nanorods are found for seed layers annealed at temperatures around 350°C.

Annealing temperature °C	100/002	101/002
250	0.098	0.169
300	0.048	0.136
350	0.039	0.051
400	0.056	0.044
450	0.295	0.074
500	0.077	0.55

From the SEM images of samples grown using multiple deposition cycles of 1x, 5x and 10x (not shown here), it is clear that ZnO nanorods grown on seed layers deposited with a single cycle demonstrate poorer alignment than nanorods produced on seed layers deposited at 5x and 10x. No differences in the dimensions of the nanorods are observed between samples produced on seed layers which were deposited with 5x and 10x cycles.

We investigated the influence of temperature and deposition cycles on the seeding process for producing CBD grown ZnO nanorod arrays. We correlate seed sizes and distribution with the morphology of the resulting ZnO nanorod arrays. We varied the annealing temperature of the seed layer between 250°C and 500°C and found that annealing temperatures around 350°C result in the most highly oriented nanorods on glass substrates.

[1] D. Lincot, MRS Bulletin, 35,0778, (2010).
 [2] C. Klingshirn, R. Hauschild, H. Priller, M. Decker, J. Zeller and H. Kalt, Superlattices and Microstructures, 38, 209, (2005).
 [3] Ü. Özgür, Ya. I. Alivov, C. Liu, A. Teke, M. A. Reshchikov, S. Doan, V. Avrutin, S.-J. Cho and H. Morkoç, J. Appl. Phys., 98, 041301, (2008).
 [4] L. Li, T. Zhai, Y. Bando and D. Goldberg, Nano Energy, 1, 91, (2012).
 [5] I. Gonzalez-Valls and M. Lira-Cantu, Energy Environ. Sci., 2, 19, (2009).
 [6] Z. L. Wang, Materials Today, 7, 26, (2004).
 [7] L. E. Greene, M. Law, D. H. Tan, M. Montano, J. Goldberger, G. Somorjai and P. Yang, Nano Lett., 5, 1231, (2005).
 [8] J. Qiu, X. Li, W. Yu, X. Gao, W. He, S.-J. Park, Y.-H. Hwang and H.-K. Kim, Thin Solid Films, 517, 626, (2008).

MEDICIONES DE DLTS EN CELDAS SOLARES POLICRISTALINAS A CAPAS DELGADAS DE CdTe/CdS

DLTS MEASUREMENTS ON CdTe/CdS POLYCRYSTALLINE THIN FILMS SOLAR CELLS

O. ALMORA^{a,b}, L. VAILLANT-ROCA^{b†}, J. C. RIMADA^b Y A. BOCIO^c

a) Departamento de Física, ISPJAE, La Habana, Cuba; oalmora89@gmail.com

b) División ENERMAT, IMRE y Facultad de Física, Universidad de la Habana, La Habana, Cuba; vaillant@fisica.uh.cu†

c) INFN-Departamentode Física, Universidad de Parma, Parma, Italia; alessio.bosio@unipr.it

† autor para la correspondencia

PACS:Thin films electrical properties of, 73.61.Ga; Thin film III-V and II-VI solar cells, 88.40.jm; Deepenergy levels, 71.55.-l; Defect levels bulk matter, 71.55.-l.

El CdTe es un semiconductor tipo II-VI que presenta gap directo cuyo valor ha sido reportado entre 1.44-156 eV ($\lambda = 861-795$ nm) [1-3]. Aprovechando estas características se diseñaron las celdas de CdTe/CdS, cuya estructura consiste en la superposición de una secuencia de capas finas sobre un sustrato. En esta secuencia la juntura p-n se forma entre una película de CdS tipo-n y la capa absorbente de CdTe tipo-p. Pero independientemente de los muchos factores que influyen en el funcionamiento de estas celdas, para la obtención de dispositivos de alta eficiencia hay un paso tecnológico que se hace imprescindible: el tratamiento térmico (TT) en presencia de Cl.

En este trabajo se presenta un estudio sobre celdas de CdTe cuyo TT (ver [4 - 6]) se desarrolla íntegramente en fase vapor. La metodología para tal TT consiste en el calentamiento de la estructura en presencia del gas HCF2Cl durante períodos en el orden de los minutos. Para reevaporar posibles restos de CdCl2 se aplica vacío, dejando la superficie del CdTe lista para el crecimiento de la capa del contacto posterior. Un estudio de niveles profundos en celdas fabricadas con este tratamiento térmico no ha sido realizado con anterioridad.

Las celdas fabricadas con este TT son caracterizadas por Espectroscopia de Transientes de Niveles Profundos (DLTS) para observar los niveles de trampa presentes en el CdTe. Esta técnica en esencia consiste en aplicar una secuencia de pulsos cuadrados a la muestra tipo diodo y medir los transientes de capacidad resultantes en función de la temperatura (ver en detalle en [7, 8]). Estos cambios de capacidad son el efecto del cambio de densidad de carga espacial y, por lo tanto, del ancho W de la zona de empobrecimiento. Midiendo la capacidad en tiempos t_1 y t_2 a partir de que se aplica el voltaje en inversa VR en una rampa de temperatura, obtenemos una señal $S(T)=C(t_2)-C(t_1)$, que es la señal DLTS

deseada. Para ciertos valores de temperatura $T_{S_{max}}$ la señal $S(T_{S_{max}})$ tiene un máximo característico de un nivel de trampa cuya constante de emisión de electrones (huecos) es $e_n(e_p)$. A la $T_{S_{max}}$ del pico de $S(T)$, $e_n(T_{S_{max}})$ ($e_p(T_{S_{max}})$) se iguala a e_{rw} (ratewindow) que viene dada por la ecuación 1. Para cada selección de los tiempos t_1 y t_2 que definen una e_{rw} habrá una $T_{S_{max}}$ correspondiente.

$$e_{rw} = \frac{\ln(t_2/t_1)}{t_2 - t_1} \quad (1)$$

Evaluando en e_p en $T_{S_{max}}$, igualando a e_{rw} , haciendo las transformaciones correctas y adimensionalizando, se puede graficar $\ln(e_{rw}/T_{S_{max}}^2)$ en función de $1/kT_{S_{max}}$ para distintos pares $(e_{rw}, T_{S_{max}})$ y realizar un ajuste lineal. La pendiente y el intercepto del ajuste permiten el cálculo de la profundidad de la trampa E_T y la sección eficaz de captura σ_n (o σ_p) respectivamente.

Por otro lado, a partir de la altura de los picos S_{max} de la señal DLTS se puede calcular la concentración de trampas N_T según la expresión 2.

$$N_T = \frac{2S_{max}}{C(0)} N_e \quad (2)$$

Aquí $C(0)$ es la capacidad de la juntura bajo la polarización en inversa VR en estado de equilibrio y N_e es la densidad de portadores mayoritarios. Esta concentración N_e efectiva fue evaluada a partir del cálculo de la concentración aparente de portadores por caracterización capacidad-voltaje (C-V) (ver [3, 9 - 11]). Las mediciones de DLTS en celdas de CdTe/CdS han sido ampliamente extendidas bajo la consideración de que la región de carga espacial está contenida solo dentro de la película de CdTe [12-15]. De esta manera los defectos del

CdTe han sido caracterizados atendiendo a las tres magnitudes que se obtienen por la DLTS: E_T , σ y N_T .

Las celdas estudiadas fueron fabricadas sobre vidrios tipo soda-lime de 2.5 cm². La secuencia de películas depositadas fue ITO/ZnO/CdS/CdTe/Sb₂Te₃/Mo. Para el TT, la estructura fue ubicada en la cámara del horno antes de crecer el contacto posterior, y la temperatura se estabilizó en torno a los 400°C. Luego se introdujo la composición de HCF₂Cl con 20-100 mbar. Después de entre 2 y 10 minutos de TT, se practicó vacío durante 10 minutos. Las celdas obtenidas reportaron eficiencias de 10.6 - 13.3% con áreas activas de 1.57-1.74 cm² y espesores de 10-15 μm.

La caracterización experimental por DLTS fue hecha con un Polaron S4600 Modular DLTS System, que cuenta con un capacímetro Boonton 72B. Complementando el sistema se utilizaron un ISM 110 de la Gantner Instruments, un multímetro Keithley 2001 y se desarrolló un software de automatización con LabView 7.1. Las rampas de temperatura se hicieron enfriando a velocidades de 0.05 K/s entre 325K y 100K (más sobre el proceso de caracterización, ver [9]).

Las curvas de señal DLTS ($S(T)$) obtenidas y el correspondiente gráfico Arrhenius de $\ln(e_{rw}/T_{Smax}^2)$ en función de $1/kT_{Smax}$ se muestran en las figuras 1 y 2 respectivamente para una celda estudiada. El máximo reportado sugiere la presencia de una trampa de huecos (a las bajas temperaturas) y el mínimo otra de electrones (a las altas temperaturas), aunque la forma ensanchada de estos picos podría significar que los máximos responden a un conjunto de niveles estrechamente separados entre sí.

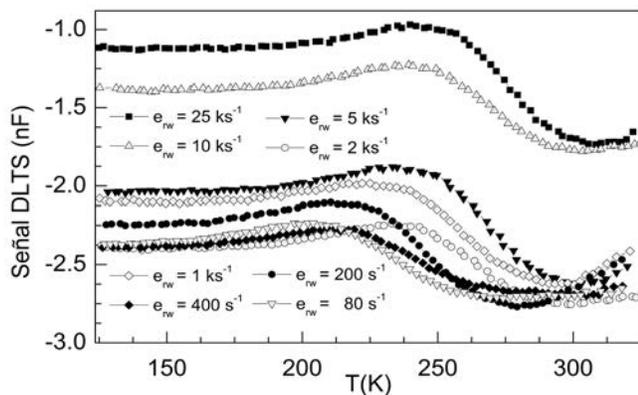


Figura 1. Mediciones de DLTS para una celda estudiada.

Los resultados del cálculo de E_T y σ se muestran también en la figura 2. La trampa del nivel aceptor pudiera asociarse con la presencia de vacancias de Cd doblemente ionizadas (V_{Cd}^{2-}) [15 - 17]. Este tipo de defecto es típico y predominante en el CdTe; la concentración de V_{Cd} define la conductividad del CdTe y por lo tanto el funcionamiento del dispositivo. Por otro lado, la trampa de electrones pudiera asociarse con las vacancias de Te simplemente ionizadas (V_{Te}^+) [15, 18]. Este tipo de nivel

donor cuando se presenta tan profundo ha sido considerado de importante efecto para la reducción de la vida media de los portadores minoritarios [19, 20].

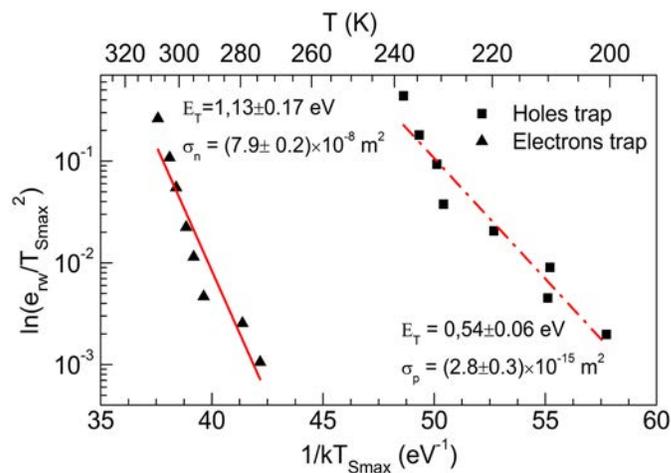


Figura 2. Gráfico Arrhenius de la constante de emisión en función de la temperatura.

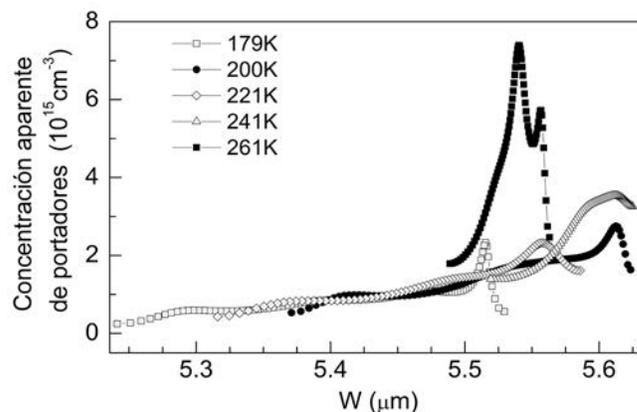


Figura 3. Gráfico de concentración de portadores en función del ancho de la zona de empobrecimiento medido respecto a la junta de CdTe/CdS.

En el CdTe las V_{Cd} y V_{Te} son propensas a manifestarse como superficies de grano con ausencia de Cd y Te [21]. Esto durante el crecimiento y el TT favorece la formación del ternario CdS_xTe_{1-x} en la interfaz principal que mejora las propiedades de transporte en la heterojuntura. Por otro lado, es de esperar que gradualmente en las regiones de la capa de CdTe más alejadas de la junta las V_{Te} sean ocupadas por átomos de Cl (Cl_{Te}) durante el TT. Este defecto extrínseco con la V_{Cd} tiende a formar el complejo raso (shallow) aceptor $V_{Cd}-Cl_{Te}$ que hace más tipo-p el CdTe [19] optimizando el contacto posterior. La no detección de este complejo pese a la presencia de V_{Cd} y V_{Te} puede estar asociada a la diferencia entre los espesores de las capas de CdTe (10-15 μm) y sus regiones de empobrecimiento (4.0-5.5 μm).

En la figura 3 se muestran las curvas de concentración aparente de portadores en función del ancho de la región de carga espacial W calculadas a partir de las características C-V de la celda. Los valores calculados arrojan un orden de magnitud de las concentraciones de trampas de 10^{15} cm⁻³ con una tendencia al aumento con la temperatura.

El estudio presentado arrojó la presencia de dos niveles de trampa para celdas de CdTe/CdS fabricadas con TT en fase vapor: uno asociado en buena aproximación a V_{Cd} y otro a V_{Te} . La presencia de estas vacancias puede significar que el TT utilizado es susceptible a mayor optimización. El objetivo en este sentido sería garantizar el aumento de la pasivación de ambos defectos en función de la formación del ternario CdS_xTe_{1-x} , en la interfaz, y de los complejos aceptores $V_{Cd}-Cl_{Te}$, principalmente en la región próxima al contacto posterior.

-
- [1] P. Lemasson, *Solid State Communications Elsevier*, 43(8) 627 (1982).
 [2] R. H. Bube, *Photovoltaic Materials* (Imperial College Press, London, 1998), pp. 135-183.
 [3] J. Poortmans & V. Arkhipov, *Thin Film Solar Cells Fabrication, Characterization and Applications* (John Wiley & Sons Ltd, England, 2006) pp. 277-324.
 [4] N. Romeo et al, 21st European Photovoltaic Solar Energy Conference, 1857, 2006.
 [5] L. Vaillant et al, *Thin Solid Films*, 516, 7075 (2008).
 [6] L. Vaillant, "Sobre las propiedades optoelectrónicas de

celdas solares de CdTe/CdS"

- Tesis de Doctorado, Universidad de la Habana, Cuba, 2008.
 [7] C. T. Sah et al, *Solid-State Electronics*, 13, 759 (1970).
 [8] D. V. Lang, *Journal of Applied Physics*, 45(7), 3023 (1974).
 [9] O. Almora-Rodríguez, "Caracterizaciones eléctricas de celdas fotovoltaicas de CdTe/CdS", Tesis de Diploma, Universidad de la Habana, Cuba, 2013.
 [10] S. M. Sze & Kwok K. Ng, *Physics of semiconductor devices*, 3rd Ed. (John Wiley & Sons Inc., New Jersey, 2007), pp. 96-98.
 [11] S.H. Demtsu & J.R. Sites, *Thin Solid Films*, 510, 320 (2006).
 [12] S. A. Ringel et al, *J. Appl. Phys.* 70(2) 881-889 (1991).
 [13] V. Komin et al, *IEEE*, 0-7903-5772-8 676-679 (2000).
 [14] A. Balcioglu et al, *J. Appl. Phys.*, 88(12), 7175 (2000).
 [15] V. Komin et al, *IEEE*, 0-7803-7471-1 736-739 (2002).
 [16] A. E. Rakhshani & Y. Makdisi, *Physics State Solid* (a), 179, 159 (2000).
 [17] X. Mathew, *Solar Energy Materials & Solar Cells*, 76, 225 (2003).
 [18] D. M. Hofman et al, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 380, 117 (1996).
 [19] T. A. Gessert et al., *Thin Solid Films* 535, 237 (2013).
 [20] Su-Huai Wei and S. B. Zhang, *Phys. Rev. B* 66, 155211 (2002).
 [21] J. Wang et al., *Surf. Interface Anal.*, 44, 434 (2012).

BIOAMPLIFICADOR CON ACOPLAMIENTO AC VS DC PARA DETECCIÓN DE ECG

BIOAMPLIFIER WITH AC VS DC COUPLING TO MEASUREMENT ECG

J. A. LEYVA-CRUZ^{a,b,†}, E. S. FERREIRA^{a,b}, R. M. N. FAGUNDES^a, A. V. ANDRADE-NETO^b, M. S. R. MILTÃO^a, A. S. ALVES^{a,b} Y M. E. CANO^c

a) Physics Instrumentation Lab. at Physics Dep. at State University of Feira de Santana, Av. Transnordestina, s/n, Novo Horizonte, FSA, 44036-900, BA, Brasil; juan@uefs.br†

b) Materials Physics Lab, Physics Dep. at State University of Feira de Santana, Av. Transnordestina, s/n, Novo Horizonte, FSA, 44036-900, BA, Brasil.

c) Centro Universitario de la Ciénaga de la Universidad de Guadalajara, Ocotlán, Jalisco. México.

† autor para la correspondencia

Palabras clave. biomedical instruments, 87.85.0x, EEG and MEG, 87.19.le, instrumentation for measurement, 07.50.-e

En la mayoría dos sistemas de medición biomédicos tales como o electrocardiograma (ECG), electroencefalograma, electromiograma, etc; es necesario la medida entre pares de detectores. Por tanto sistemas de adquisición de datos en configuración diferencial solo permite la medición de la diferencia de tensión bioeléctrica entre pares de bioelectrodos o detectores específicos y en mayoría de los casos estos sistemas deben cumplir algunas exigencias desde el punto de vista electrónico para su correcto funcionamiento. Los principales requerimientos de estos sistemas son: elevada impedancia de entrada en configuración diferencial, elevada tasa del modo común de rechazo (CMRR), baja densidad de ruido de entrada y en general en el circuito como un todo, y asegurar un óptimo funcionamiento en la banda de frecuencia de los señales de interés.

sumado al potencial offset también en modo común inducido por a interferencia electromagnética a que está sometido el circuito. Para ter uma ideia, el valor total de la amplitud de la tensión diferencial en la entrada del bioamplificador, alcanza un valor de 400 mV. Demostrando que el señal diferencial DC es 400 veces mayor que el señal de interés (1 mV). En este trabajo construimos un bioamplificador con acoplamiento ac versus dc para el estudios de biopotenciales cardíacos de un voluntario.

En la Figura 1 mostramos un diagrama esquemático de un sistema típico de bioinstrumentación. El sistema es compuesto básicamente por la fuente generadora del biopotencial, un preamplificador, etapas de filtrajes de los ruidos que incluye un filtro notch de 60 Hz, una etapa de control del ganano y finalmente la parte de adquisición de datos, utilizando la tarjeta de adquisición NIUSB6009 de 14 bits la cual fue conectada al computador por la puerta USB.

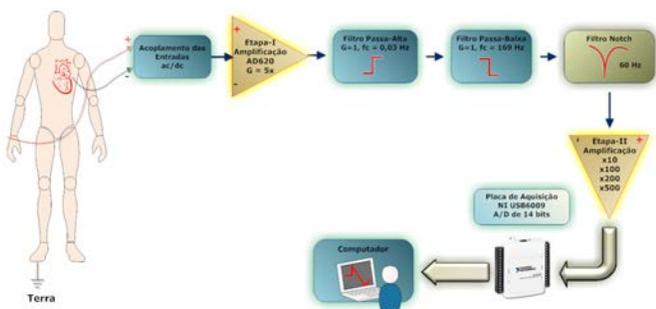


Figura 1. Representación esquemática del bioamplificador para detectar ECG.

Típicamente señales bioeléctricas son extremadamente tenues, en el caso del ECG es un señal variable en el tiempo, o sea AC, con amplitud entre 500 μ V hasta 1,5 mV, con banda de frecuencia de 0.05 Hz até 100 Hz e en algunas ocasiones pueden llegar hasta 1 kHz. Esta bioseñal es superpuesta por un señal DC de tensión eléctrica de offset como resultado de la interacción electrodo-piel, y es del orden de \pm 500 mV y por un señal en modo-comun que pode alcanzar valores de hasta 1.5 V. Este último tiene como fuentes el propio potencial offset de los bioelectrodos

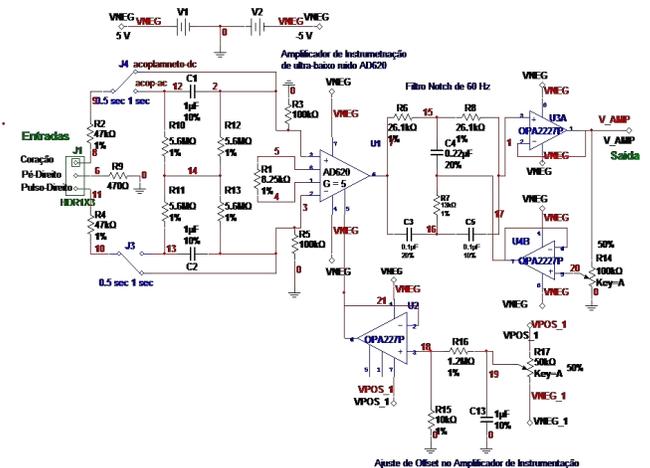


Figura 2. Representación esquemática del bioamplificador para detectar ECG.

Para la ejecución de los experimentos fue utilizada la

frecuencia de digitalización de 1 kHz, siendo que la tarjeta de adquisición fue configurada para realizar la detección de los señales bioeléctricas en modo diferencial con fondo de escala igual a ± 2.5 V. El ganó en la etapa inicial fue de 5x y en la final pueden ser escogidos varios valores (10, 100, 200 y 500). Las frecuencias de corte fueron de 0.05 Hz e 169 Hz para la etapa de filtrajes analógica pasa-baja y pasa-alta, respectivamente.

En la Figura 2 podemos observar la parte principal del circuito del bioamplificador. En ella se ve claramente la los selectores donde se escoge el tipo de acoplamiento, así como los componentes electrónico usados, destacándose el amplificador de instrumentación AD620.

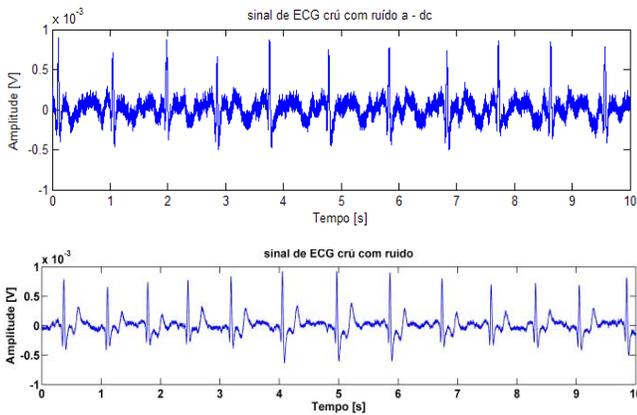


Figura 3. Señales de ECG medidos con el bioamplificador con acoplamiento dc (superior) y ac (inferior).

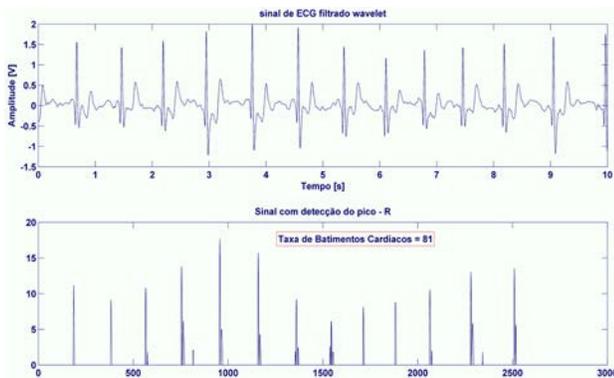


Figura 4. Señal bioeléctrico cardíaca con filtraje Wavelet (superior) y tasa de batimientos cardíacos (inferior).

En la Figura 3 es representado los señales de electrocardiogramas medidos con el bioamplificador propuesto con acoplamiento dc (superior) y ac (inferior) y sin filtraje digital. Como es mostrado, existe una pequeña mejora cuando el bioamplificador está configurado con acoplamiento ac.

En la Figura 4 es vista la señal bioeléctrica cardíaca con filtraje Wavelet (superior) y los picos usados en el cálculo de la frecuencia cardíaca que fue de 81 latidos/minutos.

Fue diseñado y construido un bioamplificador de ultra-bajo ruido para la detección automática de ECG con acoplamiento ac y dc. Una rutina para el control automático, visualización y procesamiento de los señales bioeléctricas cardíacas fue desarrollada. Los experimentos mostraron que el sistema mostro ser sensible y es capaz de registrar ECG de la actividad bioeléctrica cardíaca con una tasa señal/ruido alta en el orden de 43,5 dB. De los resultados experimentales podemos deducir que el bioamplificador en acoplamiento ac tuvo un desempeño levemente mejor.

[1] Jaakko Malmivuo, Robert Plonsey. 1995. Bioelectromagnetism - Principles and Applications of Bioelectric and Biomagnetic Fields, Oxford University Press, New York. 1995.
 [2] MASCARENHAS, V. A.; Leyva-Cruz J. A.; FERREIRA, E. S. New multichannel Bioamplifier for automatic electromyograms detection. Revista Brasileira de Fisica Medica.2012; 6(3):197-201.

EFECTOS DE DIVERSOS SUSTRATOS SINTÉTICOS SOBRE LA FABRICACIÓN DE FILMES FINOS DE QUITOSANA/FTALOCIANINAS SINTETIZADOS USANDO LA TÉCNICA DE LAYER-BY-LAYER

EFFECTS OF DIVERSE SYNTHETIC SUBSTRATES ON THE FABRICATION OF QUITOSAN/FTALOCIANINES THIN FILMS SYNTHESIZED USING THE LAYER-BY-LAYER TECHNIQUE

E. S. FERREIRA^{a,b}, J. A. LEYVA-CRUZ^{a,b†}, M. S. R. MILTAO^a, A. S. ALVES^{a,b}, A. V. ANDRADE-NETO^a Y A. S. ITO^c

a) Materials Physics Lab, Physics Dep. at State University of Feira de Santana, Av. Transnordestina, s/n, Novo Horizonte, FSA, 44036-900, BA, Brasil.

b) Physics Instrumentation Lab. at Physics Dep. at State University of Feira de Santana, Av. Transnordestina, s/n, Novo Horizonte, FSA, 44036-900, BA, Brasil; juan@uefs.br †.

c) Physics Dep. FFCLRP at São Paulo University-USP, Av. Bandeirantes, 3900, Monte Alegre, Ribeirão Preto, 14040-901, SP- Brasil.

† autor para la correspondencia

Palabras clave. Film deposition, 81.15.Fg; thin films, 73.50.Rb, optical properties of, 78.66.Hf

La modificación de superficies por deposición de filmes nanométricos de proteínas constituye un importante objetivo de la bioquímica y biotecnología actuales. Esto se justifica por el hecho de que capas organizadas de proteínas, desempeñan un papel significativo en los estudios biológicos, tales como síntesis de enzimas, biosensores, entrega de genes, etc.

La electroquímica directa de proteínas redox o enzimas en filmes obtenidos por la técnica Layer-by-layer (LBL) [1], puede establecer un modelo viable para el estudio de la transferencia de electrones entre enzimas y los sistemas biológicos. También puede proporcionar la base para la fabricación de nuevos tipos de biosensores y bioreactores, así como dispositivos médicos sin uso de mediadores. En este contexto, a técnica de fabricación de filmes finos LBL, se destaca, pues permite la adsorción alterna de proteínas cargadas, polielectrolitos y nanopartículas sobre sustratos sólidos con dimensiones controladas, en escalas nanométricas y con una mejor estabilidad [2].

Es bien sabido de la literatura que el sustrato produce diferentes efectos sobre las primeras capas de polielectrolitos depositadas por auto-ensamblaje. Los efectos más citados son: reducción o aumento en el espesor de las bicapas y la variación en la tasa de deposición, que pueden ser reducidas o incluso aumentadas [3]. En este trabajo utilizamos polielectrolitos quitosana y metalofalocianinas para la fabricación de filmes finos usando la técnica LBL, depositados sobre sustratos de vidrio, cuarzo, mica y óxido de estaño dopado con indio (ITO). El objetivo principal es entender mejor el efecto de estos sustratos en la tasa de crecimiento de las filmes finos de hasta 24 bicapas. Las perspectivas futuras serán inmovilizar biomoléculas para el estudio de su interacción con los sustratos sólidos.

En la Figura 1, ilustramos las moléculas usadas en este estudio, la Quitosana y ftalocianina (PC). La primera es un polímero derivado de un polisacárido extraído de los exoesqueletos de crustáceos. La PC es una molécula muy similar a las porfirinas naturales. Como las porfirinas, las PC pueden hospedar más de setenta iones de metales diferentes en su cavidad central. Obtuvimos filmes con un espesor de 1400 nm, medido por microscopía de fuerza atómica (AFM), lo que da un grosor de 58 nm por bi-capas. La cinética de crecimiento y morfología de los filmes fueron analizadas por espectroscopía de absorción UV-Vis y por microscopía óptica, respectivamente.

En la Figura 2 mostramos los espectros de absorción de los filmes finos para Ftalocianina de Cu y Fe (inferior) depositados sobre vidrio en función del número de capas.

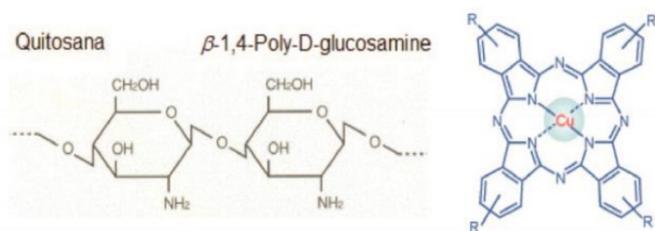


Figura 1: Moléculas de (a) quitosana y (b) metalofalocianinas utilizadas para la confección de filmes finos LBL, depositados en diversos sustratos.

Para el sustrato de vidrio el crecimiento de los filmes ocurre en dos momentos: el primero ocurre en las primeras diez bicamadas, con menor tasa de crecimiento, seguido con un aumento de la tasa de crecimiento en las bicamadas siguientes.

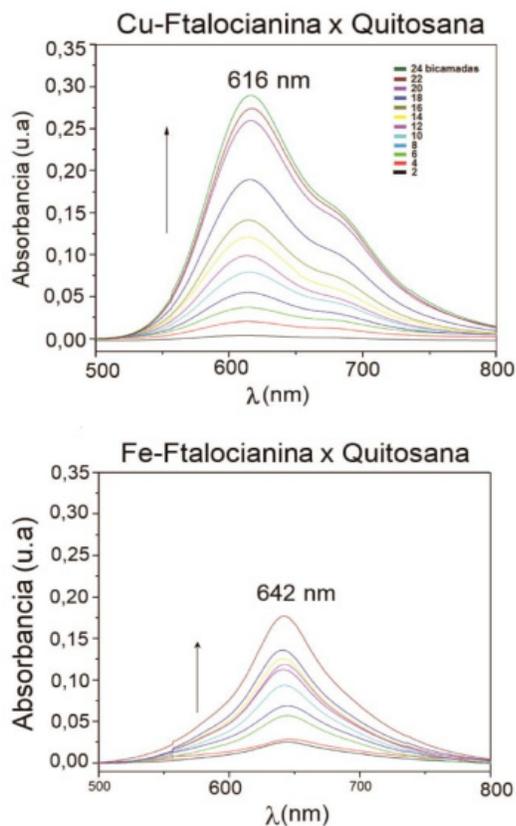


Figura 2: Espectros de absorción.

El sustrato de ITO muestra un crecimiento lineal por todas las 24 bicamadas. Después del análisis de las primeras diez bicamadas depositadas sobre los sustratos, concluimos que la mica presenta mayor tasa de deposición, resultando en mayor cantidad de material depositado, a pesar de la calidad final del filme tenga sido inferior a los otros. El filme más homogéneo y con crecimiento más lineal fue obtenido con Ni-Ftalocianina depositado sobre vidrio.

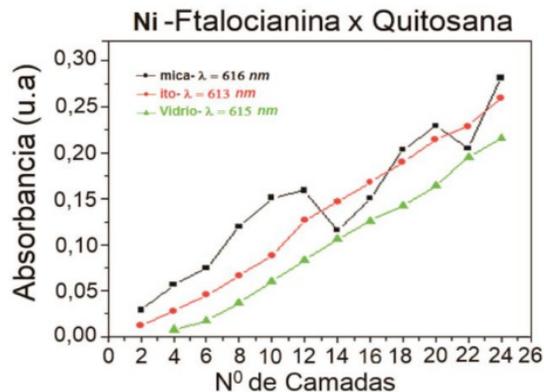


Figura 3: Cinética de Crecimiento.

- [1] J. F. Hicks, Y. Seok-Shon, and R.W. Murray, *Langmuir* 18, 2288 (2002).
- [2] [2]- Kimizuka, N., M. Tanaka, and T. Kunitake, *Chem. Lett.*, 28,1333 (1999)
- [3] W. B. Stockton, and M.F. Rubner, *Macromol.* 30, 271 (1997)

DINÁMICA NO LINEAL EN PATRONES DE SPECKLE DURANTE LA TRANSMISIÓN DEL POTENCIAL DE ACCIÓN

NONLINEAR DYNAMICS IN SPECKLE PATTERNS DURING THE TRANSMISSION OF ACTION POTENTIAL

J. J. LLOVERA-GONZÁLEZ^{a†}, A. B. MORENO-YERAS^a, J. B. CRUZ-ARENCIBIA^a, R. L. SERRA-TOLEDO^a, D. SOGA^b Y M. MURAMATSU^b

a) Departamento de Física, Facultad de Ingeniería Eléctrica, Instituto Superior Politécnico José Antonio Echeverría (Cujae), Cuba; llovera@electrica.cujae.edu.cu †

b) Grupo de Óptica y Sistemas Amorfos, Departamento de Física General, Instituto de Física, Universidad de Sao Paulo, Brasil.

† autor para correspondencia

Palabras claves: Patrones de speckle (42.30.Ms), procesos estocásticos (02.50.Ey), potencial de acción en axón gigante (87.19.Ib), dinámica no lineal (05.45.-a).

Uno de los más trascendentales descubrimientos de la fisiología realizado en la última década de los años 50 del siglo pasado lo fue el mecanismo electroquímico por el cual se genera y transmite el potencial de acción a través de las células del sistema nervioso de los seres vivos [1]. Posteriores investigaciones sugieren que tales procesos biológicos en los que intervienen reacciones químicas y transferencias de iones por difusión activa [2] responden a procesos autocatalíticos estocásticos regidos por una dinámica compleja de carácter no lineal [3].

Diversas técnicas de mediciones ópticas han sido reportadas hasta hoy, algunas basadas en la birrefringencia de la membrana que envuelve a los axones de las células nerviosas [4], [5], [6], [7].

Recientemente los autores han empleado patrones de speckle dinámicos para obtener imágenes de un axón gigante de calamar sometido a impulsos eléctricos de frecuencias variables. Estas imágenes, procesadas digitalmente, revelan algunas características de este fenómeno que no son apreciables por otras técnicas ópticas convencionales [8].

Los resultados obtenidos evidencian el carácter no lineal de este proceso obteniéndose patrones de intensidad temporalmente variable similares a los correspondientes al modelo de Lotka y Volterra para las poblaciones de víctimas y depredadores (ver Ref. [3]).

Sistema experimental: Un láser de He-Ne clase III b ($\lambda = 632$ nm y 15 mW de potencia máxima) se apuntó hacia una lente expansora. El haz expandido y colimado se orientó a un espejo inclinado 45° con la horizontal que lo desvió verticalmente pasando por un polarizador para incidir en una placa difusora de vidrio rugoso produciendo un patrón de speckle. La

muestra, un axón gigante de calamar (*Ioligo saopauliensis*), se montó dentro de una cápsula Petri sumergido en una solución salina de cloruro sódico (300 mM) ubicada sobre la platina de un microscopio óptico (OPTICOM, XSZ-107T) con amplificación 64 X. Para registrar el potencial de acción fueron colocados microelectrodos inertes uno en el interior del axón y el otro en contacto con la disolución. Un generador de señales de pulso cuadrado de frecuencia y amplitud regulables fue conectado al axón y con un osciloscopio se registró la señal excitadora y la señal de respuesta (potencial de acción). Las imágenes se capturaron con una cámara CCD con resolución 1027 x 850 pixel y rapidez de captura de 30 cuadros/s acoplada al microscopio antecedida de otro polarizador y conectada a una computadora.

Los componentes fueron montados en una mesa antivibratoria para estabilizar el patrón. (Ver figuras 1 y 2).

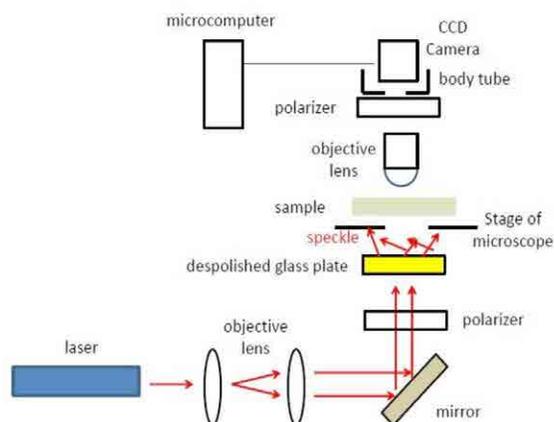


Figura 1: Esquema del sistema experimental para obtener el patrón de speckle.

Se grabaron videos de 500 fotogramas obteniéndose imágenes del patrón de speckle por transmisión a través de la membrana del borde del axón activada durante el proceso de excitación siendo observado con luz polarizada con los polarizadores tanto paralelos como cruzados apreciándose en este caso el carácter birrefringente de dicha membrana lo que se aprecia al comparar las figuras 3 y 4 respectivamente.

Videos obtenidos excitando el axón a diferentes valores de frecuencias fueron analizados eligiéndose uno en el cual la frecuencia fue de 200 kHz.



Figura 2: Montaje del sistema experimental.

Los videos fueron procesados digitalmente para estudiar las fluctuaciones de la intensidad promedio del patrón en el exterior y el interior del axón y en el seno de la membrana neurotransmisora.

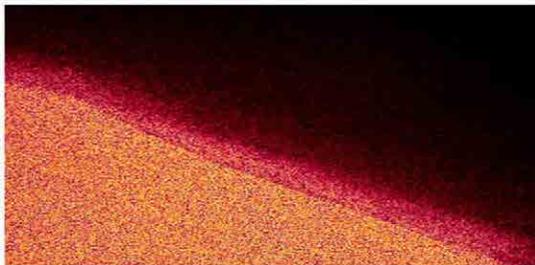


Figura 3: Patrón de speckle del borde de la membrana del axón (polarizadores paralelos).

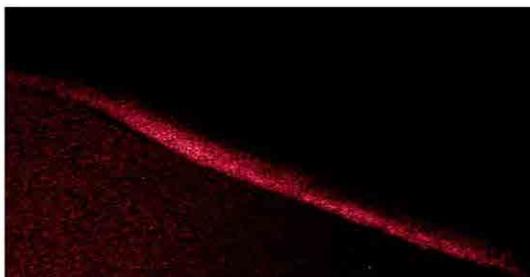


Figura 4: Patrón de speckle del borde de la membrana del axón (polarizadores cruzados).

Utilizando el programa “Tracker”, versión 4.52 [9] se

obtuvieron registros temporales de variación de la intensidad del patrón en pequeñas regiones (radio 20 pixel) ubicadas perpendicularmente al plano de la membrana en la región sobre la membrana (ver figura 5).

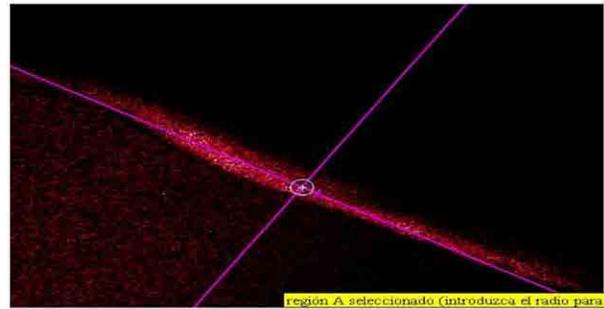


Figura 5: Imagen procesada con Tracker sobre el patrón de speckle de la membrana del axón (polarizadores cruzados).

El patrón de fluctuaciones temporales de la intensidad obtenido acusa variaciones estocásticas similares a las que se generan en los sistemas dinámicos autocatalíticos (ver figura 6).



Figura 6: Patrón de fluctuaciones temporales de la intensidad en el patrón por transmisión.

Comparando las fluctuaciones obtenidas en un punto interior a la membrana con las obtenidas en otro punto inmediato en la región de la solución salina se aprecia cierta correlación de las señales así como un desplazamiento relativo de los máximos y mínimos entre patrones lo cual puede estar relacionado con la difusión activa de iones sodio (Na^+) que penetran a través de la membrana y potasio (K^+) que salen hacia la solución y que son los responsables de la transmisión del potencial de acción (ver Ref [1]) de modo que las concentraciones respectivas cambian con un retraso en el tiempo en una y otra región. Ver figuras 7 a la 9.

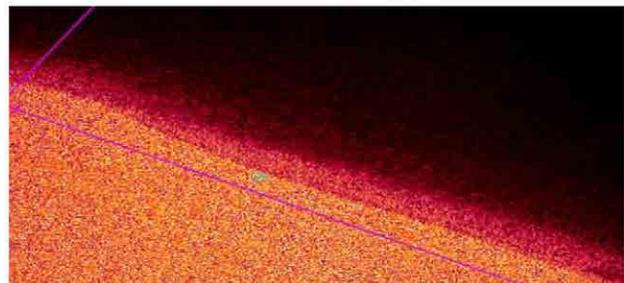


Figura 7: Imagen procesada con Tracker en la solución salina

(polarizadores paralelos).

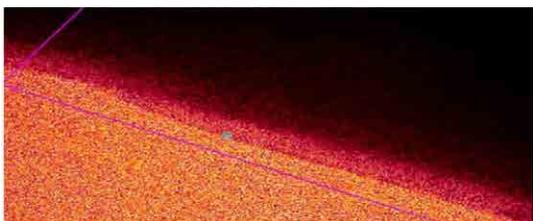


Figura 8: Imagen procesada con Tracke en la membrana neurotransmisora.

Con el objetivo de lograr mayor información de los patrones se aplicaron a los videos otros procesamientos para eliminar la señal del fondo y mejorar el contraste eliminando las componentes verde y azul de la matriz de cada cuadro dado que la luz empleada fue de un laser rojo de modo que las otras componentes solo aportan ruido a la señal.



Figura 9: Fluctuaciones temporales de la intensidad en el patrón por transmisión a través de la solución salina (a) y a través de la membrana neurotransmisora (b).

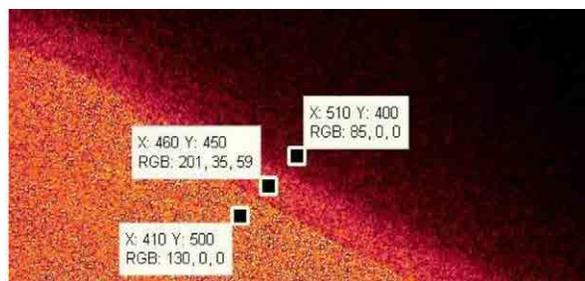


Figura 10: Puntos analizados en el eje transversal a la interfase.

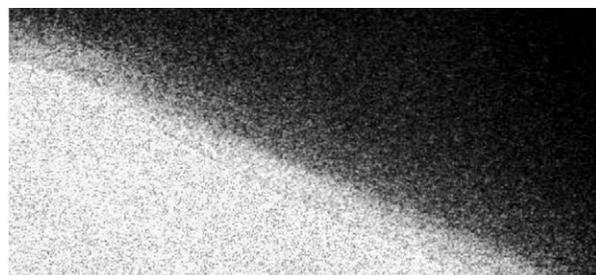


Figura 11: Imagen procesada del plano rojo.

El procesamiento aplicado en este caso utilizando recursos

de MatLab permitió descomponer cada video en todos sus cuadros, procesar cada cuadro y volver a recomponer el video para obtener los patrones de fluctuación temporal de la intensidad deseados. Los resultados de este proceso se muestran a continuación (figuras 10 y 11).

RESULTADOS OBTENIDOS AL ELIMINAR LA SEÑAL DE FONDO

Se apreció saturación de la cámara en región de la imagen y actividad de vibración en la frontera en algunos momentos.

La figura 12 muestra el plano del speckle del fondo que se restó de cada cuadro y la figura 13 muestra los puntos analizados en el video y reconfirmado.

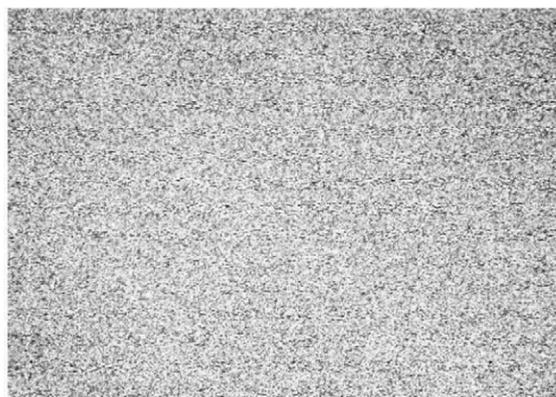


Figura 12: Plano del fondo rojo.

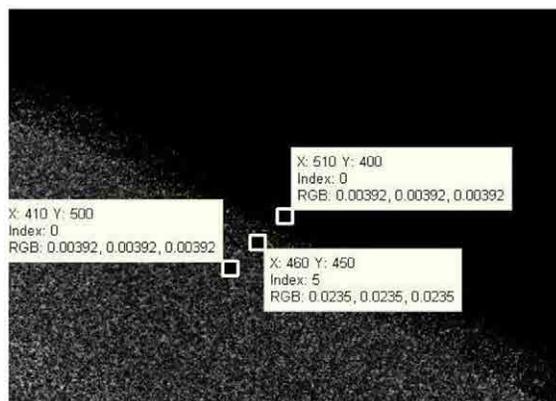


Figura 13: Puntos analizados en el plano rojo sin fondo.

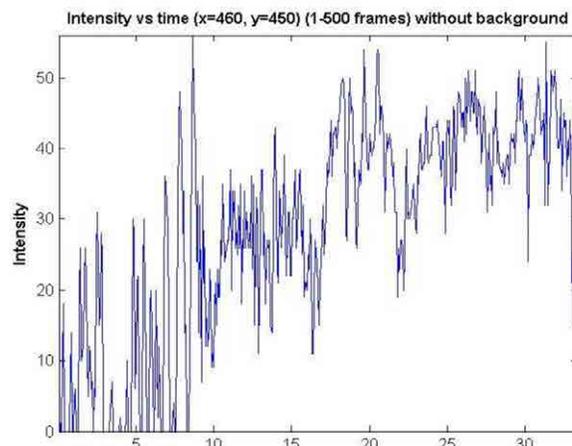


Figura 14: Patrón de fluctuaciones para el punto (460,450) sin fondo.

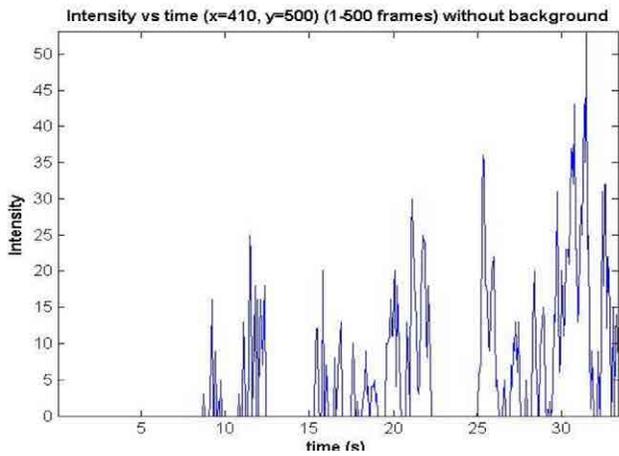


Figura 15: Patrón de fluctuaciones para el punto (410,500) sin fondo.

Para el punto (510, 400) el patrón resultó ser nulo todo el tiempo como era de esperar.

Se revela además el retardo de tiempo de las fluctuaciones en la solución salina respecto a la membrana del axón.

CONCLUSIONES

La técnica del speckle dinámico aplicada al estudio de imágenes microscópicas de la transmisión del potencial de acción en el axón gigante de calamar permite obtener valiosa información sobre la dinámica no lineal de este proceso y evidencia el carácter de proceso autorregulado inherente al mismo.

- [1] Hodgkin, A. and A. Huxley, "A quantitative description of membrane current and its application to conduction and excitation in nerve," *J. Physiol.* 117, pp. 500-544 (1952).
- [2] Guyton, A. C. and Hall, J. E. "Tratado de Fisiología Médica" Ed. Mc. Graw Hill Interamericana, Pensilvania USA (1996).
- [3] Volkenstein, M. V. "Biofísica" Ed. MIR Moscú, (1985).
- [4] Watanabe, A. Terakawa, S. "Alteration of birefringence signals from squid giant axon by intracellular perfusion with protease solution" *Biochimica et Biophysica Acta*, 436 (1976) p.p.833-842.
- [5] Landowne, D. "Optical studies of sodium channels" *Biophys. J.* © Biophysical Society Vol. 45 January (1984) p.p. 57-59.
- [6] Dombek, D. A. Blanchard-Desce, M. Webb, W. W. "Optical recording of action potentials with second-harmonic generation microscopy" *The Journal of Neuroscience*, January 28, (2004) 24(4) pp 999-1003 (Brief communication).
- [7] Carter, K. M. George, J. S. Rector, D.M. "Simultaneous birefringence and scattered light measurements reveal anatomical features in isolated crustacean nerve" *Journal of Neuroscience Methods* 135 (2004) pp. 9-16.
- [8] Llovera-González, J. J. et. al. "Dynamical speckles patterns of action potential transmission effects in squid giant axon membrane. A tribute 50 years later to the memory of the Hodgkin and Huxley Nobel Prize" *Proc. of SPIE* Vol. 8785 8785DH-1 (diciembre de 2013).
- [9] Brown, D. (2009): *Tracker 2.64*. www.cabrillo.edu/~dbrown/tracker (descargado en marzo de 2012) versión libre.

CORRECCIÓN DE INCLINACIÓN Y CURVATURA EN MICROSCOPIA HOLOGRÁFICA DIGITAL

TILT AND CURVATURE CORRECTION IN DIGITAL HOLOGRAPHIC MICROSCOPY

G. PALACIOS^{A†}, F. PALACIOS^A, J. RICARDO^A, D. PALACIOS^B, M. MURAMATSU^C, F. A. MONROY^D, J. VALIN^E, Y. CALIXTO^A, R. MUT^A Y G. MORENO^A

a) Departamento de Física, Facultad de Ciencias Naturales, Universidad de Oriente, Cuba, guillermo.palacios@cnt.uo.edu.cu †

b) Laboratorio de Física Nuclear, Universidad Simón Bolívar, Venezuela. palacios@usb.ve

c) Departamento de Mecánica, Instituto Superior Politécnico José Antonio Echeverría, Habana, Cuba. valin@usp.br

d) Escuela de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia (Sede Medellín), Colombia. famonroy@unal.edu.co

e) Departamento de óptica y sistemas amorfos, Universidad de Sao Paulo, Brasil. mmuramat@if.usp.br

† autor para correspondencia

Se propone un método para la corrección de la inclinación y la aberración cuadrática de fase del campo ondulatorio reconstruido en microscopía holográfica digital. La aberración de inclinación, inducida por la inclinación del haz de referencia, es ajustada por el cálculo del origen de coordenada en el dominio inverso del holograma, mientras que la aberración de fase cuadrática es compensada mediante el cálculo de radio de curvatura del campo en el plano del holograma. Ambos, el origen de coordenada y el radio de curvatura son determinados por la detección exacta del centro del plano focal posterior de la lente objetivo. Este método se aplica para la corrección del campo reconstruido usando los métodos clásicos de Espectro Angular y Transformada de Fourier Simple. El método fue comprobado experimentalmente a partir de hologramas obtenidos en varias instalaciones experimentales.

A method for correcting the tilt and quadratic phase aberration of the reconstructed wavefield in digital holographic microscopy is proposed. The tilt aberration, induced by the tilt reference wave, is adjusted by calculating the coordinate origin of the hologram frequency domain and the quadratic phase aberration is compensated by calculate the curvature radius of the object wavefront at hologram plane. Both, the coordinate origin and curvature radius are calculated by determining the exact position of back focal plane of the objective lens. To correct the reconstructed wavefront from the classical methods of Angular Spectrum and Simple Fourier Transform the proposed is applied. The method is experimentally verified.

Palabras claves: Digital holography microscopy, Optical processing, Reconstruction methods.

PACS: 07.05.Pj, 42.30.Rx

INTRODUCCIÓN

La Microscopía Holográfica Digital (MHD) es una técnica interferométrica de alta sensibilidad para el análisis cuantitativo de los cambios de fase introducidos por un espécimen microscópico posibilitando la visualización 3D del mismo [1], la determinación del índice de refracción y espesor con una resolución axial por debajo de la longitud de onda de la fuente iluminadora [2].

Al aplicar la técnica de MHD el resultado final se obtiene a través de dos pasos fundamentales, la captura y la reconstrucción del holograma digital. Existen diferentes métodos de reconstrucción de hologramas en MHD entre ellos los más reconocidos, por ser los primeros desarrollados, se encuentran el de Simple Transformada de Fourier (SFTF) [3], el algoritmo de convolución (CV) [4] y el algoritmo basado en el espectro angular (ASA) [5]. En general estos métodos de reconstrucción no tienen en cuenta la corrección del campo reconstruido por lo que se han desarrollado diferentes métodos complementarios para eliminar las distorsiones del

campo intrínsecas al proceso de captura y reconstrucción del holograma.

En particular, la MHD fuera de eje permite la separación de los órdenes de difracción del holograma, no obstante, se introduce una distorsión en la fase que se debe a la inclinación de la onda de referencia. Cucho et al. [6] describieron un método usando un solo holograma computando una copia digital de la onda de referencia a merced de dos parámetros ajustables con una carga computacional excesiva. P. Ferraro et al. [7] propusieron una técnica de exposición doble para compensar completamente la curvatura inherente del frente de onda en la imagen cuantitativa de fase pero es necesario registrar dos hologramas, con y sin la muestra respectivamente. Luego es necesario un procedimiento de sustracción entre los dos hologramas.

Otro método para la reconstrucción del holograma con la corrección del campo reconstruido se reconoce con el nombre de Algoritmo de Doble Propagación (DPA) [8]. Este método combina procedimientos clásicos y se basa en realizar una

primera propagación del campo hasta el plano focal de la lente objetivo y luego a partir de este plano realiza una segunda propagación hasta el plano imagen eliminando muchas limitantes que tienen los métodos tradicionales. El método DPA necesita de un algoritmo para el cálculo de la posición exacta del plano focal ubicado a una distancia z_i del plano de grabación del holograma. Para implementar el cálculo de z_i según Palacios et al. [8], es necesario conocer cuál de los componentes angulares corresponde a la imagen virtual, necesitando ubicar en el holograma la posición del centro de interferencia, además de que en [8] el cálculo de z_i depende del tamaño de la ventana de filtrado, lo que implica que varios cálculos reportan distintos z_i .

Siguiendo la idea básica del método DPA en este trabajo se propone un nuevo algoritmo basado en el método de reconstrucción SFTF y determinando de manera automática los parámetros que permiten la reconstrucción del campo sin distorsión. La aberración de inclinación, inducida por la inclinación del haz de referencia, es ajustada por el cálculo del origen de coordenada en el dominio inverso del holograma, mientras que la aberración de fase cuadrática es compensada mediante el cálculo de radio de curvatura del campo en el plano del holograma. Ambos, el origen de coordenada y el radio de curvatura son determinados por la detección exacta del centro del plano focal posterior de la lente objetivo.

PRINCIPIOS BASICOS DE LA MHD REGISTRO DEL HOLOGRAMA DIGITAL

Para el registro del holograma se han establecido dos esquemas básicos para la captura del holograma en las configuraciones de transmisión, figura 1a, y de reflexión, figura 1b.

Tradicionalmente para la configuración de transmisión es usado un interferómetro de Mach-Zhender y para la reflexión un interferómetro de Michelson. En ambas configuraciones el holograma se forma en el plano del CCD al interferir un haz objeto O y un haz de referencia R. En la configuración de transmisión el haz objeto atraviesa el espécimen mientras que en la configuración de reflexión el haz objeto se refleja sobre la muestra. Asumiendo que para el registro del holograma se utiliza una onda plana descrita por,

$$R(x, y) = |R| e^{ik_x x + ik_y y} \quad (1)$$

donde $|R|$ representa la intensidad de la onda, k_x y k_y son las componentes del vector de onda. Si además asumimos la onda objeto como,

$$O = \frac{1}{\lambda^2} \frac{\exp(ik(z_i + z_0))}{z_i z_0} \exp\left(\frac{ik}{2z_i} |r_o|^2\right) \quad (2)$$

$$\int_{\substack{EP \\ |r_E| < a}} \int_{OP} U(r_o) p\left(r + \frac{\beta_L}{\beta_P} r', \Phi, \frac{1}{F}\right) d^2 r_E d^2 r_o$$

donde $U(r_o)$ es la amplitud compleja de la onda que emerge del objeto, el término $\exp\left(\frac{ik}{2z_i} |r_o|^2\right)$ caracteriza la curvatura en fase del frente de onda en el plano imagen debido al uso de una lente (objetivo de microscopio). Y el factor $p\left(r + \left(\frac{\beta_L}{\beta_P}\right) r', \Phi, 1/F\right)$ representa las aberraciones introducidas por deformaciones en la lente y el factor de desenfoque.

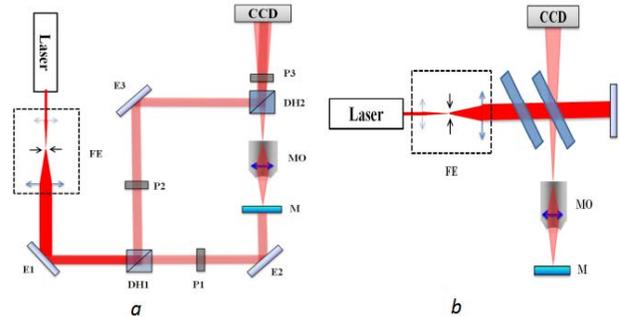


Figura 1. Esquema óptico para la captura del holograma en las configuraciones de transmisión a) y reflexión b).

El holograma es la superposición de estas dos ondas y el sistema de registro es sensible solo a la intensidad luminosa,

$$h(x, y) = |O(x, y)|^2 + |R(x, y)|^2 + O(x, y)^* R(x, y) + O(x, y) R(x, y)^* \quad (3)$$

RECONSTRUCCIÓN DEL HOLOGRAMA

Clásicamente el proceso de reconstrucción se realiza mediante la difracción de la onda de referencia en el holograma grabado y luego revelado. Este proceso de reconstrucción es equivalente a la multiplicación del holograma por una réplica virtual de la onda de referencia,

$$h(x, y) R(x, y) = \left(|O(x, y)|^2 + |R(x, y)|^2\right) R(x, y) + O(x, y)^* R(x, y)^2 + O(x, y) |R(x, y)|^2 \quad (4)$$

donde $h(x,y)R(x,y)$ es el campo reconstruido exactamente detrás del holograma, el término $(|O(x,y)|^2 + |R(x,y)|^2)R(x,y)$ representa el orden cero de difracción (la parte de la onda iluminadora que no se difracta en el holograma), $O(x,y)^* R(x,y)^2$ es el componente +1 de difracción (imagen virtual) y $O(x,y) |R(x,y)|^2$ el componente -1 (imagen real).

El proceso de propagación de la onda iluminadora al difractarse en el holograma está descrito matemáticamente mediante la ecuación de Rayleigh – Sommerfeld [9], cuya solución analítica es muy engorrosa por lo que surgen los llamados métodos numéricos de reconstrucción que son aproximaciones numéricas a dicha integral.

El método CV demanda de mucho más tiempo de cálculo [6, 9], esencialmente debido a que se usa una transformación rápida de Fourier más que los otros dos métodos. Por otra parte, el método de CV tiene la ventaja de que el tamaño de la imagen

propagada tiene la misma escala que el plano del holograma. Este no es el caso de SFTF ya que las imágenes reconstruidas y el holograma tienen escalas diferentes. Considerando que el holograma es muestreado en $M \times N$ puntos con Δx y Δy como frecuencia de muestreo, y es reconstruido a una distancia d , con una longitud de onda λ , las frecuencias de muestreo en el plano de reconstrucción son,

$$\Delta \xi = \frac{\lambda d}{N \Delta x} \quad (5)$$

$$\Delta \eta = \frac{\lambda d}{M \Delta y}$$

Según estas expresiones para lograr una alta resolución lateral la distancia del holograma a la imagen debe ser pequeña, pero la aproximación $\cos \theta \approx 1$ exige una distancia mínima de reconstrucción dada por,

$$d_{min} = \frac{a_x^2}{n_x \lambda} \quad (6)$$

donde a_x es el tamaño de la imagen, n_x es el número de píxeles en a_x .

El algoritmo SFTF puede ser usado con objetos más grande que las dimensiones del CCD, sin embargo la variación del tamaño de la imagen reconstruida representa una gran limitación para la reconstrucción de hologramas en colores. El algoritmo CV es aplicable sólo para objetos más pequeños que el CCD, esto degrada la calidad de la imagen reconstruida porque la misma es representada por sólo un número pequeño de píxeles. El algoritmo ASA no presenta las limitaciones de los métodos SFTF y CV, o sea no exige una distancia mínima por lo que se pueden reconstruir hologramas plano-imagen y no existe variación de las dimensiones de la imagen reconstruida en comparación con las dimensiones del holograma, pero en sentido general todos estos algoritmos por sí solos no tienen en cuenta la eliminación de las aberraciones de curvatura e inclinación en fase.

En este trabajo son modificadas las expresiones analíticas de los algoritmos tradicionales al incorporarles términos propios de la metodología propuesta, expresando de manera compacta el cálculo de los parámetros de la corrección de las aberraciones de inclinación y esférica.

DISTORSIÓN DEL CAMPO RECONSTRUIDO

La aberración de desplazamiento representa una manera de distorsión del campo, figura 2.

El ángulo de inclinación $\bar{\alpha}$ del haz de referencia R respecto al haz objeto O introduce un desplazamiento del campo que debe ser corregido.

Por otro lado, la aberración esférica del campo de fase reconstruido, figura 3, es producto de la curvatura del campo

introducida por la lente objetiva del sistema holográfico.

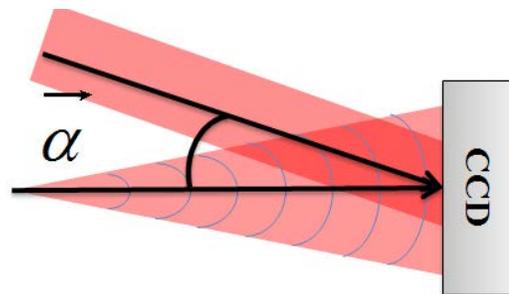


Figura 2. Aberración de desplazamiento producto de la configuración fuera de eje.

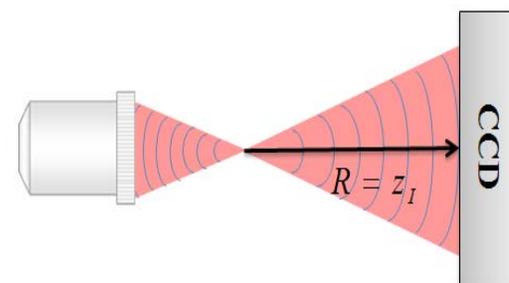


Figura 3. Aberración esférica del campo de fase reconstruido producto de la curvatura del campo introducida por la lente objetiva.

DETERMINACIÓN DE PARÁMETROS PARA LA CORRECCIÓN DEL CAMPO RECONSTRUIDO

DETERMINACIÓN DE LA DISTRIBUCIÓN DEL CAMPO EN EL PLANO FOCAL

Para implementar la metodología de corrección, primeramente se reconstruye el plano que contiene la distribución de campo $U(x_E, y_E)$ a una distancia de reconstrucción $d = z_p$, figura 4. Este plano contiene el patrón de difracción de los objetos ubicado físicamente en el plano focal posterior de la lente objetiva [8].

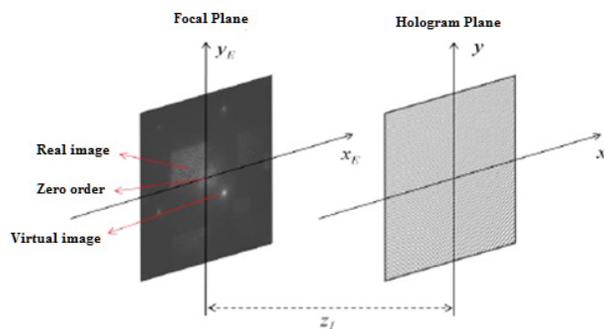


Figura 4. Reconstrucción de la distribución de campo en el plano focal posterior de la lente objetivo a una distancia $d = z_p$ del holograma.

Para determinar el plano focal es necesario determinar la distancia z_i . En este trabajo se propone un nuevo método que difiere del propuesto por [8] y consiste en aplicar la formulación de Fresnel para construir la Curva de Barrido Axial (CBA), dada por la expresión (7),

$$\psi_{max}(d) = \max \left(\left| \frac{1}{i\lambda d} \exp \left[-ik \left(d + \frac{k}{2d} (\xi^2 + \eta^2) \right) \right] \right| \times \mathcal{F} \left[h(x, y) \exp \left(-i \frac{k}{2d} (x^2 + y^2) \right) \right] \right)^2 \quad (7)$$

La construcción de $\psi_{max}(d)$, o Curva de Barrido Axial, es realizada mediante un lazo computacional que permite incrementar $d + \Delta d$ la distancia de reconstrucción, donde el paso Δd define el error de escala.

Como se observa en la figura 5, la CBA presenta un máximo absoluto cuya ordenada (para este caso específico $d = 254.05 \pm 0.01$ mm) coincide con la distancia d para la cual es máxima la intensidad luminosa. Siguiendo la hipótesis de que en plano focal de encuentra el mayor por ciento de la intensidad luminosa de la onda con respecto a todos los planos a lo largo de su dirección de propagación, es posible afirmar que esta distancia es igual a z_i que se corresponde con el radio de curvatura de la onda objeto.

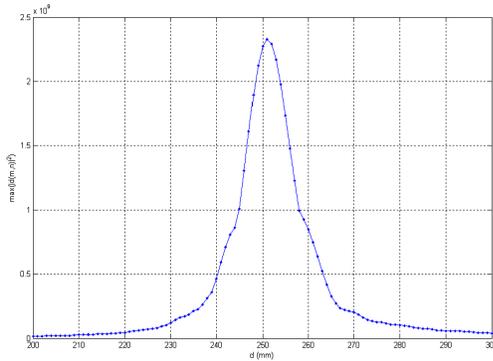


Figura 5. Curva de Barrido Axial.

Debido a que la propagación se realiza sobre todo el campo reconstruido, no es necesario seleccionar manualmente el componente angular. Es por esto que no se introducen errores de apreciación en el cálculo de z_i , sino que las incertidumbres de dicho parámetros se deben solo a inestabilidades de la instalación experimental. Esto hace que el método propuesto sea mucho más preciso que el propuesto en [8].

CÁLCULO DE LA FUNCIÓN DE CORRECCIÓN DE CURVATURA

Asumiendo que la onda objeto es esférica y su radio de curvatura es la distancia que existe entre el plano focal posterior del objetivo de microscopio y el plano de grabación del holograma, entonces su expresión será,

$$O(x, y) = \tilde{O}(x, y) \exp \left[\frac{ik}{2z_i} (x^2 + y^2) \right] \quad (8)$$

donde $\tilde{O}(x, y)$ es el campo objeto libre de curvatura en fase. El término exponencial representa el factor esférico que caracteriza la aberración de curvatura introducida por el uso

de una lente objetiva. Conociendo el valor de z_i se reconstruye numéricamente un término esférico que al ser multiplicado por el campo reconstruido eliminará el efecto de curvatura. La expresión discreta para este factor es,

$$\psi(m, n) = \exp \left[-\frac{i\pi}{\lambda z_i} (n^2 \Delta x^2 + m^2 \Delta y^2) \right] \quad (9)$$

Esta es la función de corrección de curvatura del campo que describe la curvatura de la fase en el plano del holograma (x, y), por lo que solo es válida para hologramas plano-imagen. De manera general la curvatura del campo en el plano de reconstrucción (ξ, η) será,

$$\psi(m, n) = \exp \left[-\frac{i\pi}{\lambda(z_i - d')} (n^2 \Delta \xi^2 + m^2 \Delta \eta^2) \right] \quad (9a)$$

donde d' es la distancia de reconstrucción.

CÁLCULO DE LA RÉPLICA VIRTUAL DE LA ONDA DE REFERENCIA

Asumiendo que el campo reconstruido puede expresarse por,

$$U(\mathbf{r}_E) = \mathfrak{F} [h(x, y)]_{d=z_i} \quad (10)$$

donde \mathfrak{F} representa el operador de Transformada de Fresnel. La expresión (10) significa que el plano que contiene el patrón de difracción de los objetos se puede representar como una transformada de Fresnel del holograma a una distancia $d=z_i$. Generalizando el concepto dado en [10] y teniendo en cuenta que,

$$\mathfrak{F}[h] = \mathfrak{F}[\beta\tau(|\mathbf{O}| + |\mathbf{R}|)] + \mathfrak{F}[\beta\tau\mathbf{OR}^*] + \mathfrak{F}[\beta\tau\mathbf{RO}^*] \quad (11)$$

se demuestra que,

$$\mathfrak{F}[\mathbf{OR}^*] = \mathfrak{F}[\mathbf{O}] \otimes \delta \left(f_x + \frac{\cos\alpha}{\lambda}, f_y + \frac{\cos\beta}{\lambda} \right) \quad (12)$$

donde, \otimes denota el producto de convolución, α y β son los ángulos de incidencia de la onda de referencia con respecto a las direcciones ortogonales a la propagación de la onda objeto, (f_x, f_y) las coordenadas en el dominio de las frecuencias. Debe notarse que el muestreo de la función δ representa el desplazamiento en el espacio inverso de la imagen virtual provocado por la inclinación de la onda de referencia.

Las coordenadas del máximo de intensidad en este plano, sean $(\zeta_x = \cos\alpha/\lambda, \zeta_y = \cos\beta/\lambda)$, coinciden con las coordenadas del punto focal inscrito en el centro de la imagen virtual. Aplicando conceptos básicos de geometría analítica se obtiene,

$$\begin{aligned} k_x &= 2\pi\zeta_x \\ k_y &= 2\pi\zeta_y \end{aligned} \quad (13)$$

La réplica virtual de la onda de referencia usada para la

grabación del holograma será entonces,

$$R_{iv}(m, n) = \exp\left[i\left(m\Delta x k_x + n\Delta y k_y\right)\right] \quad (14)$$

Donde m y n son números enteros que pertenecen a los dominios $(-M/2 \leq j \leq M/2)$, $(-N/2 \leq l \leq N/2)$ respectivamente, N y M son las cantidades de pixeles de la imagen en el plano inverso.

Es evidente entonces que la multiplicación de la intensidad del holograma con una réplica virtual exacta de la onda de referencia garantiza un re-direccionamiento del campo reconstruido que corrige el desplazamiento provocado por el uso de la geometría fuera de eje.

EXTENSIÓN Y FILTRADO DEL COMPONENTE ANGULAR CORRESPONDIENTE A LA IMAGEN VIRTUAL

Debido a la geometría fuera de eje usada para la captura del holograma, los términos correspondientes a la imagen virtual y real aparecen en localizaciones diferentes en el plano de reconstrucción. Además debido a la curvatura del frente de onda objeto estos componentes están limitados por un ancho y largo espectral. En este punto por conveniencia podemos expresar $\psi(m, n)$ como,

$$\psi(m, n) = \exp\left\{-i\pi\left[F_n\left(\frac{n}{N-1}\right)^2 + F_m\left(\frac{m}{M-1}\right)^2\right]\right\} \quad (15)$$

Para mayor simplicidad en el análisis asumiremos una dimensión,

$$\psi(m, n) = \exp\left[-i\pi F_m\left(\frac{m}{M-1}\right)^2\right] \quad (16)$$

Simulando el espectro de la expresión (16) para los valores, $M=1024$, $-M/2 \leq m \leq M/2-1$, $F_m=[100, 300, 500]$ encontraremos los siguientes resultados,

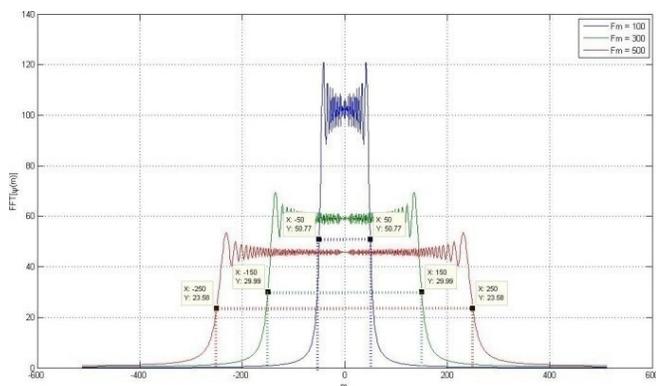


Figura 6. Simulación el espectro de la expresión (16).

Se observa de la figura 6 que para cada curva el parámetro F_m representa el alto a la media altura de la gama de frecuencias y se relaciona con el ancho espectral. Generalizando el análisis

a dos dimensiones y comparando las ecuaciones (9) y (15) se determinan las expresiones para F_m y F_n dadas por,

$$F_n = \frac{\Delta x^2 (N-1)^2}{\lambda z_l} \quad (17)$$

$$F_m = \frac{\Delta y^2 (M-1)^2}{\lambda z_l}$$

Con los parámetros F_n , F_m , ζ_x , ζ_y se construye la ventana de filtrado definida como,

$$V(m, n) = \begin{cases} 1 & \text{para } (n, m) = \left(\alpha_x - \frac{F_n}{2} \dots F_n, \alpha_y - \frac{F_m}{2} \dots F_m\right) \\ 0 & \text{para } (n, m) \neq \left(\alpha_x - \frac{F_n}{2} \dots F_n, \alpha_y - \frac{F_m}{2} \dots F_m\right) \end{cases} \quad (18)$$

De esta manera se aísla de manera automática en el espacio de inverso la zona que define la imagen virtual del resto de los componentes angulares del espectro.

RECONSTRUCCIÓN DEL CAMPO CON LA CORRECCIÓN DE LAS ABERRACIONES DE INCLINACIÓN Y ESFÉRICA

Las expresiones de los algoritmos tradicionales de reconstrucción, corrigiendo las aberraciones de inclinación y curvatura en fase y además con el aislamiento automático de la imagen virtual para realizar el filtrado del espectro en los casos necesarios son,

a) Método de Simple transformada de Fourier

$$g(m, n) = \phi(m, n) \frac{1}{i\lambda d} \exp\left[-ik\left(d + \frac{k}{2d}(\xi^2 + \eta^2)\right)\right] \times \mathcal{F}\left[h(x, y) R_{iv}(m, n) \exp\left(-i\frac{k}{2d}(x^2 + y^2)\right)\right] \quad (19)$$

b) Método basado en la Convolución:

$$g(m, n) = \phi(m, n) \mathcal{F}^{-1}\left\{\mathcal{F}\left[h(m, n) R_{iv}(m, n)\right] \times V(m, n) \mathcal{F}\left[h(k, l)\right]\right\} \quad (20)$$

c) Método del Espectro Angular:

$$g(m, n) = \phi(m, n) \mathcal{F}^{-1}\left[\mathcal{F}\left[h(m, n) R_{iv}(m, n)\right] \times V(m, n) e^{-iz\sqrt{k^2 - k_x^2 - k_y^2}}\right] \quad (21)$$

COMPROBACIÓN EXPERIMENTAL DEL MÉTODO PROPUESTO

Para mostrar la efectividad del método se presenta a continuación un ejemplo en el que se utiliza como objeto de estudio una mirilla de fase, Figura 7 (a).

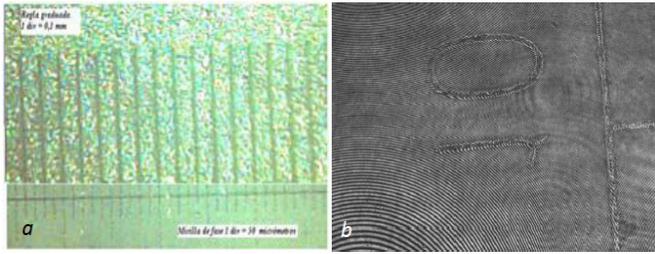


Figura 7. (a) Imagen de microscopía óptica de la mirilla de fase. (b) Holograma digital de una sección de la mirilla de fase.

Para la reconstrucción del holograma, figura 7b, primeramente se realiza el cálculo de las componentes k_x y k_y , expresadas en (13). Se obtienen los valores $k_x = -0.02108$ y $k_y = 0.02983$ con los que se construye la onda iluminadora virtual R_{iv} mediante la ecuación (14). De esta manera el componente que representa la imagen virtual queda centrado en el plano inverso del holograma, figura 8.

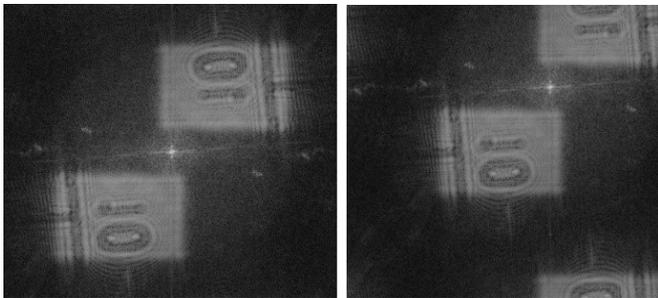


Figura 8. Desplazamiento del espectro como resultado de re-direccionamiento de la imagen virtual.

Con el filtrado del componente angular se aísla éste del resto de los elementos que componen el espectro del holograma. En la figura 9 se muestra el componente angular correspondiente a la imagen virtual aislado del resto de los componentes del espectro al multiplicar éste por la máscara $V(m,n)$. Utilizando las ecuaciones (18) se obtienen los valores de $F_n=122$ y $F_m=69$ para conformar la máscara $V(m,n)$ de acuerdo a las condiciones experimentales usadas para la captura del holograma.

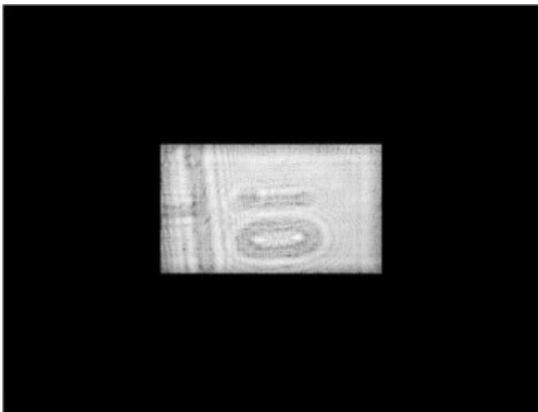


Figura 9. Componente angular correspondiente a la imagen virtual aislado del resto de los componentes del espectro.

Finalmente la manera de corregir la aberración esférica es mediante la multiplicación del factor de corrección $\psi(m,n)$, ecuación (9a), por el campo reconstruido. Utilizando el

holograma de la figura 7 (b), en la figura 10 se muestra la reconstrucción de la imagen de contraste de fase utilizando el método de reconstrucción ASA expresado por la ecuación (21). Se aprecia en la figura 10a los saltos de fase 2π propios de una reconstrucción sin corrección de la aberración esférica, sin embargo estos saltos de fase son eliminados totalmente cuando es aplicado el método de corrección de la aberración esférica al multiplicar el campo reconstruido por el factor de corrección dado por la expresión (9), figura 10b.

En la figura 10a Con la aplicación de esta ecuación para la reconstrucción del campo se tienen en cuenta los tres pasos fundamentales que componen la metodología propuesta: corrección de la aberración de inclinación, filtrado automático de la imagen virtual y corrección de la aberración esférica del haz reconstruido o haz objeto.

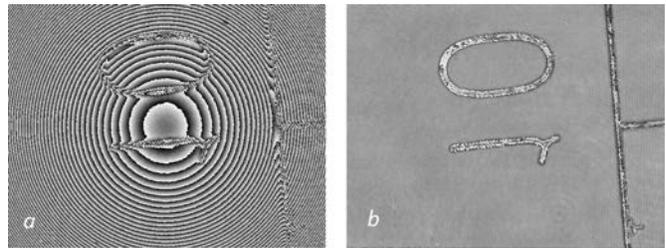


Figura 10. Resultados de aplicar el método ASA modificado. a) Reconstrucción del campo sin la corrección de la curvatura en fase, b) Campo reconstruido multiplicado por el factor de corrección de curvatura.

CONCLUSIONES

En este trabajo se demostró que con la determinación de las componentes del vector de onda de la onda iluminadora virtual se corrige totalmente la aberración de inclinación debido al uso de la geometría fuera de eje en una instalación de MHD. Debido a que con la metodología propuesta se logra determinar con gran precisión el radio de curvatura de la onda objeto, es posible compensar la aberración esférica presente en la fase del campo reconstruido. Se propuso además una forma de determinar las dimensiones del componente angular correspondiente a la imagen virtual en el plano del holograma con lo que se logra automatizar por completo el proceso de reconstrucción usando los algoritmos tradicionales de reconstrucción numérica.

AGRADECIMIENTOS

Al Profesor Dr. Mikiya Murmatsu (Grupo de Óptica y Sistemas Amorfos del IFUSP), al Profesor Dr. Freddy Alberto Monroy Ramírez (UNC Sede Medellín Facultad de Ciencias – Escuela de Física) por disponer de instalaciones experimentales de MHD para la captura de los hologramas mostrados en este trabajo.

[1] Gabor, D., Nature, 161(4098): p. 777-779, (1948).

[2] Monroy, F.A., Microscopía Holográfica Digital de Objetos de Fase, in Departamento de Física. 2008, Universidad

Nacional de Colombia: Bogotá. p. 130.

[3] Yaroslavsky, L. & Merzlyakov, N. (1980), Consultants Bureau

[4] Goodman, J.W. and R.W. Lawrence, Appl. Phys. Lett., 11, p. 77-79, (1967).

[5] Schnars, U., J. Opt. Soc. Am. A. 11, p. 2011, (1994).

[6] Demetrakopoulos, TH.; Mittra, R., Appl Opt., 13, p. 665-670, (1974).

[7] Yu, L. & Kim, M.K., Opt Lett, 30, p. 2092, (2005).

