

# DINÁMICA GRANULAR CONTROLADA POR LUZ





En el Año Internacional de la Luz

Revista Cubana de Física ISSN 0253-9268 Online ISSN 2224-7939

#### **REVISTA CUBANA DE FÍSICA** Vol. 32, No. 2, (Dic. 2015) ISSN 0253-9268 Online 2224-7939

#### **EDITOR**

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

#### EDICIÓN ELECTRÓNICA

J. J. GONZÁLEZ, R. CUAN Facultad de Física, Universidad de la Habana jjgonzalez@fisica.uh.cu, rcuan@fisica.uh.cu

#### **EDITORES ASOCIADOS**

A. J. BATISTA-LEYVA 0. DÍAZ-RIZO INSTEC, La Habana abatista@instec.cu, odrizo@instec.cu

W. BIETENHOLZ UNAM, México wolbi@nucleares.unam.mx

G. DELGADO-BARRIO IMAFF-CSIC, Madrid Mgerardo@imaff.cfmac.csic.es

V. FAJER-ÁVILA CEADEN, La Habana vfajer@ceaden.cu

J. O. FOSSUM NTNU, Noruega jmn@hha.sld.cu

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

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

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

T. POESCHEL University Erlangen-Nuremberg thorsten.poeschel@fau.de

T. SHINBROT **Rutgers University** shinbrot@soemail.rutgers.edu

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

#### **DISEÑADORES**

DANIEL DÍAZ, ERNESTO ANTÓN, E. ALTSHULER

Portada: Un haz láser sirve para controlar mecánicamente la altura desde la que se alimenta una pila de arena. Más información en la página 44.

Todos los artículos en formato -e: www.fisica.uh.cu/bibloteca

#### LA REVISTA CUBANA DE FÍSICA ES UNA PUBLICACIÓN SEMESTRAL de la Sociedad Cubana de Física

#### **COORDENADAS**

71 LA PARADOIA DEL SASTRE Y EL CLIENTE: REFLEXIONES SOBRE LA DURACIÓN DE LA **CARRERA DE LICENCIATURA EN FÍSICA** O. de Melo

#### **ARTÍCULOS ORIGINALES**

74 The reordering transition in layer disordered solids: rare earth-TRANSITION METAL INTERMETALLIC ALLOYS [TRANSICIÓN DE REORDENAMIENTO EN SÓLIDOS DE CAPAS DESORDENADAS: ALEACIONES INTERMETÁLICAS DE TIERRAS RARAS - METALES DE TRANSICIÓN] A. Pentón-Madrigal, E. Estévez-Rams, C. Azanza-Ricardo, R. Lora

80 Interacción de los modos de precipitación en el endurecimiento de aceros **MICROALEADOS** 

[Interaction between the precipitation modes in the hardening of MICROALLOYED STEELS] E.V. Morales, E. Silva-González, I. S. Bott, H. -J. Kestenbach

87 THE LONG-TAIL DISTRIBUTION FUNCTION OF MUTATIONS IN BACTERIA [La función de distribución de cola larga de las mutaciones en bacterias] A. González

91 COMPOSITO DE CUO/TiO2 OBTENIDO UTILIZANDO UNA NUEVA Y SENCILLA TÉCNICA [CuO/TiO2 composite obtained using a new and simple technique] F. Forcade, B. González, R. Snyders, G. Guisbiers, S. Santana, E. Vigil

#### RAY PATHS THROUGH A GRIN LENS: THE CRYSTALLINE CASE 97

[Paso de luz a través de una lente grin: el caso del cristalino] R. C. Cruz-Rodríguez, A. L. Batista-Planas, O. Núñez-Chongo, C. Muñoz-Villaescusa, A. J. Batista-Leyva

#### 102 EFECTO UNRUH EN UN CAMPO ESTOCÁSTICO DE VACÍO [ON THE UNRUH EFFECT OF A STOCHASTIC FIELD OF VACUUM] A. González-Lezcano y A. Cabo-Montes de Oca

#### COMUNICACIONES ORIGINALES

#### 107 IMPROVEMENT OF THE FIRST CUBAN LASER DENSITOMETER [MEJORÍAS AL PRIMER DENSITÓMETRO LÁSER CUBANO] P. J. Larrea-Cox, L. Hernández-Tabares, E. Valdés-Santurio, S. Fernández-Llanes, B. Robaina-Martínez

11() SOLAR FIBER BURST DYNAMICS: REGULAR, DETERMINISTIC CHAOS OR STOCHASTIC [DINÁMICA DE EXPLOSIONES SOLARES FIBER: REGULAR, CAOS-DETERMINÍSTICA O ESTOCÁSTICA]

L. Cuendias Pérez, A. L. Méndez Berhondo and A. K. Díaz Rodríguez

112 SISTEMA OPTO-MECÁNICO PARA EL CRECIMIENTO CONTROLADO DE PILAS GRANULARES [Opto-mechanical system for the controlled growth of granular piles] L. Domínguez-Rubio, E. Martínez, E. Altshuler

#### **MOMENTOS DE LA FÍSICA EN CUBA**

- 116 El desarrollo de la investigación en óptica en Cuba [OPTICS RESEARCH IN CUBA] V. Fajer y M. Sánchez-Colina
- 123 EL IV SLAFES: UNA MIRADA A 40 AÑOS DE DISTANCIA [THE IV SLAFES: A GLANCE 40 YEARS AFTER]

D. de J. Alamino-Ortega

 125 CELEBRANDO EL CUADRÁGESIMO QUINTO ANIVERSARIO DE LA PRIMERA GRADUACIÓN DE FÍSICOS EN LA UNIVERSIDAD DE ORIENTE

 [CELEBRATING THE 45<sup>th</sup> ANNIVERSARY OF THE FIRST GRADUATION OF PHYSICISTS AT UNIVERSIDAD DE ORIENTE]
 L. M. Méndez-Pérez, P. Muné Bandera y E. J. Roca Oria

#### PARA FÍSICOS Y NO-FÍSICOS

128 NEUTRINOS: MYSTERIOUS PARTICLES WITH FASCINATING FEATURES, WHICH LED TO THE PHYSICS NOBEL PRIZE 2015 [NEUTRINOS: PARTÍCULAS MISTERIOSAS CON CARACTERÍSTICAS FASCINANTES QUE LLEVARON AL PREMIO NOBEL DE FÍSICA 2015] Alexis Aguilar-Arévalo y W. Bietenholz

#### 138 NUESTRA FÍSICA EN NOTICIAS

#### OBITUARIOS

## 141 UN PILAR DE LOS LABORATORIOS DOCENTES: MERCEDES NAVARRO FERNÁNDEZ (SEPTIEMBRE 24, 1942 - AGOSTO 26, 2015) [A PILLAR OF TEACHING LABORATORIES: MERCEDES NAVARRO FERNÁNDEZ (SEPTEMBER 24, 1942 - AUGUST 26, 2015] J. Portelles, R. Fundora y E. Altshuler

#### 142 Leaving a mark in Havana: Leo P. Kadanoff (January 14, 1937 – October 26, 2015) [Dejando una marca en la Habana: Leo P. Kadanoff (enero 14 de 1937 – octubre 26, 2015)]

E. Altshuler

## LA PARADOJA DEL SASTRE Y EL CLIENTE REFLEXIONES SOBRE LA DURACIÓN DE LA CARRERA DE LICENCIATURA EN FÍSICA

Osvaldo de Melo

Presidente, Comisión Nacional de Carrera Licenciatura en Física

Según cuenta Miguel de Cervantes en "El Ingenioso hidalgo Don Quijote de la Mancha", cuando Sancho Panza llegó a gobernar la ínsula "Barataria" se vio enseguida en posición de juzgar un pleito entre un sastre y un cliente que reclamaba que el primero le había la había hecho cinco caperuzas de un tamaño tan pequeño que apenas podían cubrir las yemas los dedos. El sastre explicó que el cliente le había traído un pedazo de paño y le había preguntado si podía de él hacer una caperuza. Al responderle el sastre que sí, el cliente entonces preguntó si saldrían dos, a lo que el sastre también respondió afirmativamente. Y así continuó el cliente regateando y el sastre respondiendo hasta que llegaron a concertar el negocio para cinco caperuzas. El cliente quería su paño de vuelta y el sastre el pago de la hechura ¿Quién llevaba razón? En definitiva, no se habían puesto de acuerdo en el tamaño de las caperuzas.



¿Cuánto debe durar la carrera para formar un egresado de licenciatura en física? Como en la historia de Sancho, es un asunto también de regateo: al menos en primera instancia, depende de qué licenciado se quiere y de los recursos de que se disponga.

Como reza en un documento emitido por la Comisión Nacional de Carrera de Licenciatura en Física (CNCF) en 2014 como respuesta a una solicitud de modificar la carrera para hacerla de cuatro años<sup>1</sup>:

La idea presenta varias ventajas. En primer lugar significa un ahorro de tiempo, recursos y esfuerzos. Los estudiantes se graduarían un año más jóvenes, el costo de la carrera se reduciría, se aliviaría la carga docente de los hoy muy deprimidos claustros. Además, nos acercaríamos al uso habitual del mundo occidental, que probablemente se hará predominante también en nuestro país, si bien está aún por demostrarse que los planes de reducción del pregrado en Europa, provenientes de los acuerdos de Bolonia<sup>2</sup> hayan resultado beneficiosos.

...Y lo más importante, haría más evidente la necesidad de implementar la continuidad de estudios hacia programas de maestría y doctorado de una fracción de estudiantes que reúnan las condiciones para convertirse en investigadores o profesores universitarios.

Pero para analizar el asunto con más profundidad debemos hacer un poco de historia. En los primeros años de este siglo el Ministerio de Educación Superior (MES) confeccionó los lineamientos para los planes de estudios D. En ellos se promovía una disminución apreciable de las horas presenciales a costa de un mayor peso del trabajo no presencial del estudiante, así como una disminución en las asignaturas que tenían examen final. En aquellos años, la comisión CNCF se aprestó a diseñar el nuevo plan de estudios siguiendo en gran medida la propuesta de los lineamientos. Sin embargo, prácticamente al final del proceso de elaboración del nuevo plan, se recibió en la CNCF los programas de las disciplinas de formación general (Educación Física, Marxismo-Leninismo e Idioma Extranjero,

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Acuerdos de la Commisión Nacional de la Carrera de Física en su reunión de 14 de Marzo de 2014. Los miembros de la comisión que participaron en la elaboración del documentos fueron: Osvaldo de Melo (Universidad de La Habana) Carlos Rodríguez (Universidad de La Habana) Roberto Mulet (Universidad de La Habana) José Antonio Rodríguez (Universidad de La Habana) Octavio Calzadilla (Universidad de La Habana) Luis Hernández (Universidad de La Habana) Julio Vidal (Universidad de La Habana) José Marín Antuña (Universidad de La Habana) Ernesto Altshuler (Universidad de La Habana) Luis Méndez (Universidad de Oriente)

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Ver sitio official del Proceso de Bolonia: http://www.dfes.gov.uk/bologna/

por ejemplo) confeccionadas por las respectivas comisiones nacionales. No sin cierta sorpresa, vimos que no se había reducido el número de horas en esos planes, ¡más bien en algunos casos se había incrementado! Extrañamente, las comisiones nacionales no habían seguido la letra de los lineamientos. Al parecer, lo que era bueno para las asignaturas específicas de la carrera no lo era para las de formación general. Esto significó que la disminución de las horas presenciales en los planes D se llevó a cabo a costa, exclusivamente, de las asignaturas específicas de la carrera.

Pasados unos pocos años de puesto en marcha del plan D, las comisiones de carrera recibieron otras propuestas. Esta vez, abrir la posibilidad de aumentar las horas presenciales y aumentar también la cantidad de exámenes finales. La razón era que el Plan D "no se adecuaba a las realidades del país". A la CNCF (que se mantenía más o menos fiel a los principios inspiradores del plan D) no le pareció bien la idea, lo que no evitó que algunas de las asignaturas de formación general que no tenían examen final lo agregaran. Por último, llegamos al momento actual, donde parece estarse regresando a una tendencia a la disminución de la actividad presencial. Pero no sólo en horas: ahora también en años.

Se hace difícil seguir la lógica de la evolución de la tendencia en cuanto al tema de las horas presenciales, sobre todo porque son las mismas instancias las que han promovido una u otra variante alternadamente. Debido a este carácter oscilante, parecería que no hay una idea clara, en cuanto al asunto de la carga presencial de los estudiantes, en los encargados de definir el destino de la educación superior en nuestro país. O tal vez se estén limitando a transmitir ideas de niveles superiores, empeñados en ahorrar recursos y carentes de una asesoría experta en los temas de educación superior.

Ante la propuesta actual, surgen inmediatamente algunas preguntas. Primero que todo, ¿qué piensan las comisiones nacionales que conforman los programas de las disciplinas de formación general en esta ocasión sobre la reducción en años y horas de las carreras? ¿Qué porciento de horas o cuántas asignaturas se van a reducir por parte de estas disciplinas? Como las Comisiones Nacionales de Carrera pueden influir bien poco en estos parámetros, sería bueno, para comenzar a discutir el tema que, al contrario de lo que sucedió en el Plan D y para no tener las mismas sorpresas, se comenzara por dar a conocer el programa de las disciplinas del formación general en una supuesta carrera de cuatro años.

Al mismo tiempo y pensando en probables variantes que lleven a carreras de cuatro años, uno continuaría preguntándose: ¿se suprimirá la educación física o el inglés como asignaturas presenciales en el currículo de la carrera, tal y como es práctica en la inmensa mayoría de las carreras de física a nivel internacional?; ¿cuántas asignaturas y cuantas horas quedarán en las disciplinas Preparación para la Defensa y Marxismo-Leninismo? ¿Se mantendrán las 24 horas presenciales de Pedagogía y las 64 de Historia de Cuba? ¿Se pretende que esta reducción ulterior a la del Plan D se haga sólo a costa de las asignaturas específicas de la carrera? El conocimiento de esto a priori, es imprescindible para generar una proyección real de lo que se quiere hacer. Porque

si la reducción a cuatro años se realiza sin afectar o afectando sólo levemente las horas y asignaturas de formación general, todo parece indicar que los licenciados, como las caperuzas del sastre, van a resultar muy pequeños.

El problema, además, tiene otras aristas. Como también señala el documento emitido por la CNCF en el 2014 citado anteriormente:

La idea de reducir a cuatro años el plan de estudios también tiene desventajas. Su resultado inmediato sería graduar un licenciado con una formación incompleta con respecto a la de hoy. La principal (aunque no única) insuficiencia estaría en su nivel de entrenamiento para la investigación científica, que tendría que reducirse cuantitativamente (menos horas) y también cualitativamente (trabajos más sencillos). Esta actividad constituye hoy la mayor fortaleza de la carrera de física; es la vía fundamental para la actualización del plan de estudios y principal forma de interacción educativa de los profesores-tutores con los estudiantes.

A diferencia de lo que ocurre con otras muchas carreras, las principales fuentes de empleo para los físicos cubanos en los próximos años serán la investigación científica o la docencia universitaria, profesiones en las que la investigación científica es esencial. La demanda real, incrementada por el éxodo y las jubilaciones, supera ampliamente a la oferta de graduados, afectada por las pequeñas matrículas y la baja eficiencia durante las últimas décadas. Por tanto, nuestros graduados deberán entrenarse para investigar. En las circunstancias actuales, la mejor forma de brindar ese entrenamiento [...] es mediante su incorporación al trabajo científico estudiantil, bajo la supervisión de sus profesores, en grupos de investigación de las propias universidades o en algunos pocos centros seleccionados donde existe un ambiente de investigación adecuado.

En efecto, la reducción de la carrera a cuatro años otorgaría un rol muy importante al posgrado en cuanto a la formación de capacidades de investigación científica. Y el posgrado en Cuba tiene una serie de particularidades propias, como por ejemplo el hecho de no tener definida la figura de un estudiante de maestría o doctorado. Para agravar más esta situación, muchos de los centros donde están ubicados los recién graduados no tienen condiciones para realizar trabajos de investigación, y no en pocas ocasiones prohíben la realización de la maestría a los jóvenes. Continuando con la glosa del documento de la CNCF antes citado:

A su vez, las investigaciones universitarias en Física descansan fuertemente sobre el trabajo científico estudiantil. La reducción de éste último afectaría a las primeras. A diferencia de otros países, dónde los cursos de maestría y doctorado son el principal soporte de las investigaciones universitarias, en nuestro caso son los programas de licenciatura. La causa es que nuestro postgrado es poco numeroso y está débilmente institucionalizado pues no existen becas para estudiantes regulares de maestría y doctorado, ni un presupuesto independiente para estos programas...

... Además [...] nuestro postgrado no compite con los de otros países que ofrecen gran cantidad de becas y mejores condiciones de trabajo y de vida, en programas a los que nuestros egresados ingresan fácilmente y en los que se desempeñan con gran éxito. El destino probable de nuestros licenciados de cuatro años será ir a cursar la maestría o el doctorado en otros países, con lo que estaríamos estimulando adicionalmente la ya elevada fuga (o robo) de cerebros. En fin, parece que la introducción de un rasgo aislado de las tendencias internacionales, como es el acortamiento de las carreras, en un medio plagado de tendencias nacionales sui generis como son las características del sistema de posgrado y el porciento tan elevado de asignaturas de formación general, produciría una mezcla más bien perjudicial.

Sancho Panza decidió castigar a los dos contendientes. El sastre no recibiría dinero por las hechuras mientras que el cliente no recuperaría el paño. Valga la enseñanza: no aceptemos la propuesta de reducción de carrera con ligereza si no podemos garantizar de verdad un licenciado con un mínimo de calidad. Porque después vamos a salir perdiendo todos; sastres y clientes.

### THE REORDERING TRANSITION IN LAYER DISORDERED SOLIDS: RARE EARTH - TRANSITION METAL INTERMETALLIC ALLOYS TRANSICIÓN DE REORDENAMIENTO EN SÓLIDOS DE CAPAS DESORDENADOS: ALEACIONES INTERMETÁLICAS DE TIERRAS RARAS - METALES DE TRANSICIÓN

Arbelio Penton-Madrigal<sup>a,b†</sup>, Ernesto Estevez-Rams<sup>a,b</sup>, Cristy Azanza-Ricardo<sup>c</sup> y Raymundo Lora Serrano<sup>d</sup>

a) Facultad de Física, Universidad de la Habana, 10400 La Habana, Cuba; arbelio@fisica.uh.cu<sup>+</sup>

b) Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de la Habana, 10400 La Habana, Cuba

c) University of Trento, Dipartimento di Ingegneria dei Materiali e delle Tecnologie Industriali, via Mesiano 77, 38050 Trento, Italia

d) Instituto de Fisica, Universidade Federal de Uberlandia, 38400-902 Uberlandia-MG, Brazil

+ corresponding author

#### Recibido 20/9/2015; Aceptado 20/10/2015

Planar faulting in in rare earth - cobalt alloys with type structures  $Th_2Ni_{17}$  and  $Th_2Zn_{17}$  are studied. The structure changes from hexagonal for heavy rare earth to rhombohedral for light rare earth, all exhibiting different degrees of planar disorder. Faulting is quantitatively studied beyond the model of independent faulting events showing the strength of direct solutions to extract defects information from the diffraction patterns. It is showed that the analysis of the decaying term of the probability correlation function, does not only allow to quantify the loss of memory in the system through the correlation length but also, the strength of interaction between faults. The behavior of the decaying terms turns not to be of universal character when scaled against the correlation length and instead depends on the interaction of faulting. The reconstructive phase transition in this system seems to follow a path where the new phase appears within the disordered phase and grows without homogeneous reordering of the disordered arrangement.

Se estudia la ocurrencia de defectos planares en aleaciones de tierras raras - cobalto con estructuras tipos Th2Ni17y Th2Zn17. La estructura cambia desde hexagonal para tierras raras pesadas hasta romboédrica para tierras raras ligeras. La ocurrencia de defectos se estudia cuantitativamente más allá del modelo de ocurrencia de defectos independientes mostrando la robustez de las soluciones directas para extraer información sobre defectos a partir de los patrones de difracción. Se demuestra que el análisis del término de decaimiento de la función de correlación de probabilidades, no solo permite cuantificar la pérdida de memoria en el sistema a través de la longitud de correlación, sino también el grado de interacción entre defectos. El comportamiento del término de decaimiento muestra no ser de carácter universal cuando este es escalado respecto a la longitud de correlación y en su lugar depende de la interacción entre defectos. La transición de fase reconstructiva en este sistema parece seguir un recorrido donde la nueva fase emerge dentro de la fase desordenada y crece sin un reordenamiento homogéneo del arreglo desordenado.

PACS: planar faulting 61.72.Bb, intermetallic 61.72.Dd, diffraction 61.72.Nn

#### I. INTRODUCTION

Planar faults are frequent crystal defects. The disruption of the periodicity in the stacking order leads to measurable effects in the profiles of the maxima of the diffraction pattern of a crystal [1].

Random faulting model (RFM) with independent occurrence of defects is the oldest and simplest model that can be considered, and there is an extensive literature on this approach specially for the so called deformation and growth faults. The RFM considers non interacting defects, this assumptions allows to make mathematical simplifications that results in analytical expressions for the faulting probability [1–6]. Yet, by its very nature, the strong assumption of non-interaction makes the RFM valid in the range of low density of defects.

More recently, there has been an attempt to extract useful information on the stacking order from the diffraction pattern without considering any underlying order, or any particular model for disorder. Yet, it has been argued that methods that do not depend on specific faulting

models [7–9] have little to non practical utility [10]. In this article we will show that this is not the case, and the information obtained from faulting models can be reproduced by non-faulting-model approaches without the strong assumptions of non-interacting defects.

Furthermore, even in the case where it is clear the presence of large density of defects, and therefore independent faulting does not hold, direct methods still applies. In this sense direct approaches are of broader scope than ad hoc defect models, besides from being, from a theoretical point of view, a more consistent framework from which mathematical treatment of faulting can be based [6–8].

In order to develop this ideas,  $RE_2Co_{17}$  (RE: rare earth) alloys will be studied. This compounds have a rhombohedral structure for light rare earth, while the alloys with heavy rare earth exhibit a hexagonal symmetry stacking. In all cases the structures shows different degree of planar disorder [11, 12].

The main result of this analysis, is to show how the correlation length can be used to compare degree of disorder between faulted structures without regard to the actual type of defect happening. The scaling of the decaying term in the correlation function has no universal character and instead depends on the interaction between defects.

The remainder of this contribution is organized as follows. In section II the probability correlation function and the associated correlation length will be introduced and their relation to the diffraction pattern of the layer structure will be explained. In section III the disordered nature of the  $RE_2Co_{17}$  alloys will be described as inferred from the X-ray diffraction patterns of the studied samples, this results will be used in section IV to discuss reordering phase transition in the studied intermetallic compounds. The correlation length will be used as a parameter that allows to quantitatively measure disorder without regard of the actual type of faulting. Finally, in section V, it will be shown the scaling behavior of the decaying term in the probability correlation function of the  $RE_2Co_{17}$  structures. Conclusions will then be given.

## II. THE PROBABILITY CORRELATION FUNCTION AND THE CORRELATION LENGTH

If faults are considered to be independent (non interacting) then, due to the stochastic nature of the process, a probability can be associated with the event of occurrence of each type of defect [3]. This approach lacks validity when planar faults starts interacting and the assigned fixed probability looses physical meaning.

In any case, as defects by definition need to show some random behavior, the occurrence of planar disorder results in the loss of correlation in the stacking sequence. Loss of correlation means that knowing the stacking sequence at a finite number of consecutive sites in the crystal does not allow, unambiguously, to predict the complete stacking sequence of the infinite crystal.

To characterize correlations in the stacking sequence of close packed structures, the probability correlation function  $P_i(\Delta)$  was first introduced by Wilson [1] and Warren [3] and since then, has been central, directly or indirectly, to the treatment of faulting [4, 13–15].  $P_0(\Delta)$  is the probability of finding two layers,  $\Delta$  layers apart, in the same position (A - A, B - B, C - C). Similarly,  $P_f(\Delta)$  is defined for pair of layers of the type A - B, B - C or C - A and  $P_b(\Delta)$  for the remaining choices. Normalization condition for the probabilities at each  $\Delta$  value holds.

In terms of the correlation function, the loss of long range order means that the  $P_i(\Delta)$  (i=0, f, b) tends to 1/3 for large enough  $\Delta$  values. This behavior is interpreted as loss of memory of the system: knowing the layer position up to a particular site, for a sufficiently large  $\Delta$  value, one can only make an unbiased guess as to which layer, A, B or C can be found.

For an Ising model of faulting, it has been found that the loss of correlation can be described by an exponential decaying behavior [13], which in turn allows to introduce a correlation length as the characteristic  $\Delta_c$  value for which the decaying part of  $P_i(\Delta)$  falls to 1/e. Even if the type of Ising model used for simulating stacking disorder has been strongly

criticized [16], the exponential decaying nature of the  $P_i(\Delta)$  for the disordered crystal holds in a more general context [17,18] as found in experimental cases [4].

Recently Tiwary and Pandey [10] have shown that within the deformation and growth random faulting model, the decaying behavior of the correlation functions collapse to a master curve when scaled with respect to  $\Delta_c$ . This result should come as no surprise, as it can be derived from the analytical functions describing the correlation functions as readily demonstrated by the same authors [19].

If layer structures are considered, where the arrangement is built by different displacement (but not rotation or reflection of the layers) of a basic two dimensional periodic layer, the interference function for a powder sample can be written as [8,9]

$$Q(l) = 1 + 2\sum_{\Delta=1}^{N_c - 1} A_{\Delta} \cos(2\pi\Delta l), \qquad (1)$$

where *l* is the coordinate associated with the reciprocal base vector  $c^*$  taken as the stacking direction,  $N_c$  is the number of layers, and  $A_{\Delta}$  is the Fourier coefficient, which can be expressed as a linear function of  $P_s(\Delta)$ . Equation (1) gives the possibility of directly obtaining the Fourier coefficient from the diffraction pattern.

In the case of close packed structures

$$A_{\Delta} = P_0(\Delta) + (1 - P_0(\Delta)) \cos [2/3\pi(h - k)]$$
(2)

the use of eqs. (1) and (2) allows to calculate from the diffraction pattern, the pair correlation function  $P_0(\Delta)$ .

Instead of using directly equation (1) to adjust the diffraction profile as done in Ref. [8], where dozens of Fourier coefficients are directly extracted from the data and instability in the solution can result, a less numerically unstable approach can be designed if it is assumed that the correlation function can be in general described by two terms [15]

$$P_0(\Delta) = Decay \ term \times Oscillating \ term = D(\Delta) \times O(\Delta),$$

where, the decaying term  $D(\Delta)$  has an exponential behavior of the form  $\exp(-\Delta/\Delta_c)^k$ . Such functional dependence is a simple generalization of previous approaches [13, 19]. Different from those models, here the value of *k* is not predefined according to some criteria about the nature of the disorder but instead, is left to be adjusted from the actual experimental data.

Under the above assumptions, the following analytical profile function can be deduced [15]

$$\nu_{\Delta}(l) = \nu_0 \{ G^c_{\Delta}(l) + S \ G^s_{\Delta}(l) \}$$
(3)

where  $G^{c}_{\Delta}$  and  $G^{s}_{\Delta}$  are the symmetrical and the anti-symmetrical component of the peak profile, respectively.

$$G_{\Delta}^{c}(l) = \frac{1}{2} \sum_{\Delta=1}^{\infty} \exp[-(\frac{\Delta}{\Delta_{c}})^{k}] \cos[2\pi\Delta(l_{0} - l)]$$
(4)

$$G^{s}_{\Delta}(l) = \frac{1}{2} \sum_{\Delta=1}^{\infty} \exp[-(\frac{\Delta}{\Delta_{c}})^{k}] \sin[2\pi\Delta(l_{0}-l)]$$
(5)

the parameters to be fitted are the peak position  $l_0$ , the correlation length  $\Delta_c$ , the exponent k and the coefficient S which governs the weight of the asymmetry in the peak profile, together with an intensity scale factor  $v_0$ . In this way, the number of refined parameters drops from a large number (as much as Fourier coefficients are needed to reproduce the profiles) to only five.

Contrary to the use of empirical analytical expressions for describing peak profiles, equations (4) and (5) are not arbitrary mathematical convenient functional forms which allows to introduce fitting parameters as needed. We should expect that when the physical system departs significantly from planar faulting dominant role, the obtained equations are incapable of describing the peak profile.

The correlation length introduced in such a way is more general in the sense that it does not directly depends on a particular faulting model or Ising dynamical calculations.

#### III. RE<sub>2</sub>CO<sub>17</sub> INTERMETALLIC COMPOUNDS

 $RE_2Co_{17}$  alloys can be described as close packed layer structure with one type of layer. They can be found in two crystallographic modifications, one described as a rhombohedral crystal system ( $Th_2Zn_{17}$  - type structure, R3m- space group), which occurs for the lighter rare earth, and the other a hexagonal crystal system ( $Th_2Ni_{17}$  - type structure,  $P6_3/mmc$  - space group) corresponding to heavier rare earth [11]. Both crystallographic modifications can be considered as a result of the ordered substitution of RE atoms by Co pairs in the  $RECo_5$  structure ( $CaCu_5$  - type structure) [12].

One single layer, no matter which of both crystals structure is considered, is formed by two planes of atoms; a Co<sub>9</sub> atomic plane and a mixed  $RE_2Co_8$  plane. However, the stacking order can be followed taking only into account the mixed planes. The 3R (The symbol is in the Ramsdel notation composed by the number of layers in the periodic unit followed by the symmetry of the 3D lattice for the perfect crystal) rhombohedral stacking corresponds to a sequence ABCABCABC..., while the 2H hexagonal one corresponds to a *ABABAB*... stacking order.

The planar disorder in  $RE_2Co_{17}$  alloys is studied as we go from the rhombohedral stacking sequence to the hexagonal stacking sequence while changing the rare earth elements. The analysis can be taken as effectively freezing the reconstructive phase transformation at different stages of development.

#### **III.1. EXPERIMENTAL DETAILS**

The samples were obtained from starting materials of 99.9 % purity, melted several times to achieve homogeneity, and further annealed at 1273 K for two weeks and then slowly cooled. The studied alloys were prepared with rare earth Pr, Nd, Sm, Gd, Tb, Dy, Ho and Lu.

The X-ray diffraction experiments were conducted on the beam line XRD1 at the LNLS synchrotron facility in Campinas, Brazil. The Hubber diffractometer with a hexagonal arrangements, are found (figure 1b). From the

Bragg-Brentano optical system consisted of a bending magnet light source, a double - crystal Si (111) monochromator and a Ge (111) crystal analyzer. The specimen was mounted in a 10 mm diameter rotating sample holder; the radiation energy was 7098.6 eV. The diffraction data were collected at room temperature, with fixed count number and a step of  $0.005^{\circ}$ . A LaB<sub>6</sub> sample was used as an external standard reference material (SRM).

The lattice parameters were calculated from those reflections which are not affected by planar disorder using a least square fit with an external SRM [20]. The diffraction pattern were then converted from  $2\theta$  to *l* values, using the corresponding lattice parameter for each alloy. Profiles were fitted by the function (3) using equations (4) and (5). Figure 1 shows the agreement between data and fitted function for two reflections. The solid curve represents the result of the refinement procedure. It can be noted that the calculated profiles does not overfit the experimental data as it does not follow the rapidly varying background noise of the recorded signal.

#### **III.2. THE DIFFRACTION PATTERNS**

As expected, the diffraction patterns of the  $RE_2Co_{17}$ compounds for light rare earth atoms (RE= Pr, Nd, Sm, Gd) shows a rhombohedral crystal structure, while those corresponding to heavy rare earth elements (RE= Ho, Lu) exhibit a hexagonal crystal structure. In the middle range (RE= Tb, Dy) mixed reflections are observed, which can be indexed assuming either a rhombohedral or a hexagonal stacking arrangement. The mixed reflections suggest the possibility of a mixture of both phases as the absence of additional reflections excludes the existence of higher order polytypes. In all cases, the reflections fulfilling the condition  $h - k \neq 3p$ , where p is an integer are clearly broadened. This selective broadening effect is typical for a system with stacking faulting [3].

The refined line positions shows very small deviation from the Bragg position of the rhombohedral  $(l_0 = 1/3)$  and the hexagonal ( $l_0 = 3/2$ ) perfect sequence.

Figures 1a and 1b shows the (211) and the (203) reflections for the studied compounds  $RE_2Co_{17}$ . On the top left side of the figure, the low intensity reflection (203) for  $Tb_2Co_{17}$ has been magnified. The points represent the experimental data, the solid curve the fitted peak. The shape of the peaks reveals different degree of planar disorder. The correlation length for the Lu compound was fitted to  $\Delta_c = 174$  layers which decreases to  $\Delta_c = 48$  layers for the Ho sample (figure 1a), indicating a drastic increase of disorder. The same figure shows the evolution of the (211) reflection of the rhombohedral compounds  $RE_2Co_{17}$  with RE=Pr, Nd and Gd. The three alloys have a similar correlation length around 20-25 layers.

As already described, for the middle range of rare earth elements mixed reflections from rhombohedral and hexagonal reflection (203), a correlation length for the hexagonal polytype can be calculated while the same calculation, can be performed for the rhombohedral phase using the (211) reflection.



Figure 1. Fragment of a periodic interval of L with diffuse diffraction peaks at the position  $l_0 = 1/3$  corresponding to the reflection (211) associated to a rhombohedral stacking sequence and at the position  $l_0 = 3/2$ , reflection (203) of a hexagonal stacking sequence. The inset shows the magnified (203) reflection for the  $Tb_2Co_{17}$  sample.

Table 1. Refined  $\Delta_c$  and k parameters obtained from the experimental diffraction pattern using equation (3). The fourth column is the  $\Delta_c$  value obtained using the method described by [10] for those samples where the random faulting model holds. (\*Calculated according to [10])

$RE_{2}Co_{17}$	$\Delta_c$	k	$\Delta_c^*$
	R/H	R/H	
Pr	25/-	1.01/-	26
Nd	24/-	0.97/-	22
Sm	15/-	1.00/-	17
Gd	20/-	1.01/-	15
Tb	19/6	0.99/0.71	-
Dy	8/36	0.85/0.87	-
Ho	-/48	-/1.00	49
Lu	-/174	-/1.08	152

For the Tb sample the rhombohedral arrangement shows a  $\Delta_c$  value of 19, three times that for the hexagonal phase with a value of 6. The Dy sample, on the other hand, shows an reverse relation of the correlation length values with 8

and 36 layers for the rhombohedral and hexagonal stacking, respectively.

Table 1 summarizes the obtained  $\Delta_c$  and k values from the fitted profiles.

IV. REORDERING PHASE TRANSITION AND THE DEPARTURE FROM THE RANDOM FAULTING MODEL

Figure 2 now shows the behavior of the correlation length for all the studied samples. The  $\Delta_c$  value for the hexagonal phase decrease as we go from the heavy rare earth alloy  $Lu_2Co_{17}$ , to the lighter one  $Tb_2Co_{17}$ . The reverse behavior is shown by the rhombohedral phase, which increases the correlation length as we go from  $Dy_2Co_{17}$  to the even lighter alloy  $Pr_2Co_{17}$ . The smallest  $\Delta_c$  value (largest density of defects) occurs for the Tb sample.

The correlation lengths were also calculated following the procedure described in [10] for those alloys for which the RFM holds, and compared to the values obtained from the fitted diffraction patterns. Results are shown in Table 1. A good agreement between the values reported from both approaches is found, confirming the robustness of the procedure followed in this work. More importantly, this agreement points to validity of the  $\Delta_c$  value calculated from the direct approach, for the region where RFM is no longer a valid approximation.

For the mixed phase alloys, the difference in correlation length between both stacking arrangement for the same alloy can be understood as follows.



Figure 2. The correlation length  $\Delta_c$  for the rhombohedral and hexagonal phase for the studied rare earth alloys. The rare earth are organized in increasing atomic number.

The absence of additional reflections in the diffraction pattern shows that higher order polytypes do not occur. There is a unique stacking direction in both symmetries and the 3R stacking sequence of the rhombohedral phase has a full match with the 2H stacking of the hexagonal one, leading to the absence of arrested ordering near the boundary between both phases. Going from Pr to Lu, already for the Tb sample, large enough domains (to coherently diffract) of hexagonal stacking appear, the number and size of such domains increases as heavier rare earth are considered. This behavior follows from the increase of the coherent length for the hexagonal phase for Dy, Ho and Lu, in this order.

The fact that  $\Delta_c$  value for the rhombohedral phase does not decrease significantly, shows that the emergence of the hexagonal phase is a result of reordering within the  $R\bar{3}m$  phase without increase of disorder (or decrease, for that matter). This mechanism of reconstructive phase transformation is at odds with the RFM, where phase transformation is driven by the twinning faults (assisted by the deformation errors), and the emergence of hexagonal phase is at the expense of gradual disappearance of the cubic local environments. For independent growth and twinning faulting, the coexistence of both phases is excluded and the line dividing both phases as a function of defect probabilities is well defined [6]. The behavior shown in figure 2 is more consistent with nucleation and growth of hexagonal domains within the  $R\bar{3}m$  crystal structure.

## V. SCALING OF THE DECAYING TERM IN THE CORRELATION FUNCTION

Tiwary and Pandey reported the collapse of the decaying part of  $P_0(\Delta)$  to a master curve when scaled with normalized  $\Delta/\Delta_c$  values [10]. The collapse is verified by simulation, within the tight constrains of the RFM.

From the experimental data, the decaying contribution to the  $P_0(\Delta)$  was extracted and scaled according to the fitted  $\Delta_c$  value for each sample. The results is shown in figure 3. As can be seen, the curves do not merge into a single master curve but instead a more rich behavior is observed: Master curves can be seen for weak faulting, one for the rhombohedral alloys and one for the hexagonal alloys.



Figure 3. The decaying term of the  $P_0$  correlation function scaled according to the correlation length  $\Delta_c$  calculated for each sample. Curves fall into three master curves corresponding to the rhombohedral, mixed and hexagonal stacking order.

For strong faulted samples there is no master curve. This behavior is consistent with the analysis already done.

#### VI. CONCLUSION

It has been shown that the correlation length can be extracted from the diffraction data without need to assume the random faulting model by directly fitting the diffraction data.

The developed procedure was used to analyze the layer disorder in  $RE_2Co_{17}$  alloys which undergoes a reordering transition from rhombohedral to hexagonal arrangement when going from the light rare earth elements to the heavy rare earths. The increasing ordered character of the hexagonal phase was quantified as well as the evolution of the rhombohedral stacking through the value of the correlation length. Scaling behavior was proved to be of non-universal character.

The analysis shows the strength of the direct approach to the analysis of the diffraction pattern of planar disordered structures. The used approach allows to recognize more complex defect behavior than independent occurrence of disorder. This is specially relevant in the case at hand, as the samples considered are, at room temperature, between two polytypes belonging to the same polytypic family.

#### VII. ACKNOWLEDGMENT

The authors would like to thank LNLS, in Campinas, Brazil for the synchrotron experiments and the financial assistance in the framework of the project D12A-XRD1-1830. The program CAPES/MES-CUBA (310/2012) Cooperation Brazil Cuba is also acknowledge for partial financial support. This work was also supported by CLAF.

This work was partially financed by FAPEMIG under the project BPV-00047-13. EER which to thank PVE/CAPES for financial support under the grant 1149-14-8. Infrastructure support was given under project FAPEMIG APQ-02256-12.

#### REFERENCES

- [1] A. J. C. Wilson, Proc. Roy. Soc. A, 180, 277, (1942).
- [2] C. N. J. Wagner, Acta Metall., 5, 477, (1957).
- [3] B. E. Warren, "X-Ray Diffraction", Ed. Addison-Wesley, (1969).
- [4] D. Pandey and P. Krishna, J. Phys. D: Appl. Phys., 10, 2057, (1977).
- [5] L. Velterop, R. Delhez, Th. H. Keijser, E. J. Mittemeijer and D. Reefman, J. Appl. Phys., 33, 296, (2000).
- [6] E. Estevez-Rams and U. Welzel and A. Penton-Madrigal and E. J. Mittemeijer, Acta Cryst., A64, 537, (2008).
- [7] E. Estevez-Rams and J. Martinez-Garcia and A. Penton Madrigal and R. Lora Serrano, Phys. Rev. B, 63, 054109, (2001).
- [8] E. Estevez-Rams and A. Penton-Madrigal and R. Lora-Serrano and J. Martinez-Garcia, J. Appl. Cryst., 34, 730, (2001).
- [9] E. Estevez-Rams and B. Aragon-Fernandez and H. Fuess and A. Penton-Madrigal, Phys. Rev. B, 68, 064111, (2003).

78

- [10] P. Tiwary and D. Pandey, Acta Cryst., A63, 289, (2007).
- [11] K. Kumar, J. Appl. Phys., 63, R13, (1988).
- [12] R. Lora-Serrano and E. Estevez-Rams and A. Penton-Madrigal and J. Fidler and R. Grössinger and J. C. Tellez, Sol. Stat. Comm., 122, 105, (2002).
- [13] S. P. Shreshta and D. Pandey, Europhys. Lett., 34, 269, (1996).
- [14] E. Estevez-Rams and B. Aragon-Fernandez and H. Fuess and A. Penton-Madrigal, Phys. Rev. B, 68, 064111, (2003).
- [15] E. Estevez-Rams and M. Leoni and B. Aragon

Fernandez and P. Scardi and H. Fuess, Phil. Mag., 21, 4045, (2003).

- [16] S. Ahmad and M. KA. Khan, Phys. Stat. Sol. (b), 218, 425, (2000).
- [17] R. Berliner and S. A. Werner, Phys. Rev. B, 34, 3586, (1986).
- [18] R. Berliner and O. Fajen and H. G. Smith and R. L. Hitterman, Phys. Rev. B, 40, 12086, (1989).
- [19] P. Tiwary and D. Pandey, Acta Cryst., A63, 481, (2007).
- [20] H. Toraya and M. Kitamura, J. Appl. Cryst., 23, 282, (1990).

### INTERACCIÓN DE LOS MODOS DE PRECIPITACIÓN EN EL ENDURECIMIENTO DE LOS ACEROS MICROALEADOS INTERACTION BETWEEN THE PRECIPITATION MODES IN THE HARDENING OF THE MICROALLOYED STEELS

E. V. Morales<sup>a†</sup>, R. Silva González<sup>a</sup>, I. S. Bott<sup>b</sup>, H.-J. Kestenbach<sup>c</sup>

a) Departamento de Física. Universidad Central "Martha Abreus" de Las Villas. CP 54830. Santa Clara. VC. Cuba. evalen@uclv.edu.cu<sup>+</sup>

b) Departamento de Engenharia de Materiais/DEMa, Pontifícia Universidade Católica de Rio de Janeiro/PUC-Rio, Rua Marques de S. Vicente 225, Gávea, Rio de Janeiro, RJ, CEP 222541-900, Brazil.

c) Departamento de Engenharia de Materiais/DEMa. Universidade Federal de São Carlos. Rod. Washington Luis, Km 235, CEP 13565-905, São Carlos. SP. Brasil.

+ autor para la correspondencia

Received 16/9/2015; Accepted 30/9/2015

PACS: Precipitation hardening, 81.40.Cd; TEM, 68.37.Lp; Precipitation in phase transformations, 81.30.Cd; Yield stress, 62.20.fg; Metals, 64.70.Kd.

#### I. INTRODUCTION

En los aceros microaleados es normalmente aceptado que el incremento de la resistencia de la matriz ferrítica se deba entre otros factores a la formación de finos precipitados. Estos carburos y/o carbonitruros pueden ser originados en la fase austenítica dada la baja solubilidad de los mismos con la temperatura, durante la transformación  $\gamma \rightarrow \alpha$ , conocida como precipitación interfásica, y sobre las dislocaciones en la ferrita sobresaturada a las más bajas temperaturas [1–4]. La precipitación en estas dos últimas situaciones es más fina y conforme con algunos autores [5, 6], puede ser coherente o semicoherente con la matriz ferrítica aspecto significativo en la elevación de la resistencia mecánica de los aceros microaleados.

Una extensa discusión referente a los mecanismos de endurecimiento por precipitación se encuentra en la literatura [7–9]. En realidad si los finos precipitados aparecen en la ferrita no puede categorizarse que el mecanismo de corte de partículas propuesto por Nicholson [8] nunca suceda y solo predomine el bordeo de ellas por las dislocaciones según el modelo de Orowan [10]. Se reporta [9] que una evidencia directa de los mecanismos por los cuales las dislocaciones atraviesan las interfases de las partículas precipitadas en los aceros microaleados y laminados en caliente aun no está del todo claro, debido básicamente a las dificultades en observar estas pequeñas partículas en las estructuras deformadas. No obstante, la generalidad de los resultados publicados [9] referentes al endurecimiento por precipitación en esta clase de aceros confirma la existencia de una relación inversa entre la resistencia mecánica con el tamaño de partícula, aspecto a favor del mecanismo de Orowan, ya que la tensión de corte de las partículas muestra una relación directa con sus tamaños [8].

Observaciones por microscopía electrónica de transmisión (MET) de finos carbonitruros, formados aleatoriamente

durante la transformación de la austenita en ferrita  $(\gamma \rightarrow \alpha)$  mostraron que los precipitados con tamaños aproximadamente de 3 a 6 nm eran totalmente incoherentes con la matriz [11, 12]. Esto puede indicar que el modelo de endurecimiento propuesto por Orowan puede operar desde estadíos muy tempranos para estas finas partículas y por lo tanto constituir un mecanismo fundamental en el endurecimiento de estos aceros.

La aplicación de la teoría de Orowan para la precipitación interfásica encontrada en un acero microaleado al Niobio [13] explicó satisfactoriamente el incremento de los niveles de resistencia mecánica. Los autores [13] asumieron que la distancia entre las hileras de carbonitruros se podía corresponder numéricamente con el espaciamiento observado entre las partículas de una distribución aleatoria. Con esta hipótesis fue posible estimar, con mayor confiabilidad, el aumento de la resistencia mecánica de este acero microaleado donde operaron distintos modos de precipitación después del tratamiento termomecánico.

#### II. TEORIA DE OROWAN-ASHBY

La primera contribución importante para explicar el endurecimiento de las aleaciones por partículas no deformables dispersas se debió a Orowan [10], quién estableció una relación entre la tensión de cizallamiento ( $\tau$ ) con la distancia entre las partículas (*L*).

$$\tau = \frac{G \cdot b}{L} \tag{1}$$

siendo G el módulo de cizalladura y b el vector de Burgers de las dislocaciones.

Posteriormente, Ashby [14] realizó estudios sobre los mecanismos de endurecimiento por precipitación, donde considera principalmente la naturaleza de las dislocaciones

(cuña o helicoidal) y la interacción entre las mismas. De dependencia de  $n_s$  con la fracción de área ( $f_a$ ) ocupada por esta forma un estimado para el endurecimiento teniendo en las partículas es expresada por: cuenta solo las dislocaciones de cuña, es dado por:

$$\tau_c = \left(\frac{G \cdot b}{2\pi L}\right) \ln\left(\frac{x}{2b}\right) \tag{2}$$

Consecuentemente, considerando los defectos de línea helicoidales:

$$\tau_h = 1.5 \left( \frac{G \cdot b}{2\pi L} \right) \ln \left( \frac{x}{2b} \right) \tag{3}$$

donde *x* es el diámetro medio de las partículas en el plano de deslizamiento de las dislocaciones.

El endurecimiento resultante dado por la dispersión de las partículas debe considerar la interacción entre los dos tipos de dislocaciones. Por tanto, fue tomado la media geométrica [15] de las expresiones 2 y 3, o sea:

$$\tau = 1.2 \left(\frac{G \cdot b}{2\pi L}\right) \ln\left(\frac{x}{2b}\right) \tag{4}$$

Considerando además el carácter aleatorio de la distribución de partículas en la matriz, apoyado en los trabajos de Kocks [16] y Foreman & Makin [17], el incremento de la resistencia mecánica puede ser expresado por:

$$\tau = (0.84) \cdot 1.2 \left(\frac{G \cdot b}{2\pi L}\right) \ln\left(\frac{x}{2b}\right) \tag{5}$$

Dada la dificultad para determinar el diámetro medio de las partículas en el plano de deslizamiento (*x*), es conveniente emplear en la ecuación 5 el diámetro medio observado en las láminas finas (d) observadas al MET. La correlación entre estos parámetros microestructurales, que fue primeramente propuesta por Fullman y citada por Gladman [18], es dada por la ecuación 6:

$$x = \sqrt{\frac{2}{3}}d \to x = 0.82d \tag{6}$$

Como el factor de Taylor para estos aceros se aproxima a dos [18], *G* = 80300 MPa y *b* =  $2.5 \cdot 10^{-4} \mu m$  en la ferrita, se obtiene la expresión para el endurecimiento por precipitación según el modelo de Orowan-Ashby [MPa]:

$$\sigma_{o-a} = \left(\frac{6.5}{L}\right) \ln(1640 \cdot d) \tag{7}$$

Si se asume una distribución aleatoria de partículas con diámetro medio d, la ecuación 7 puede ser modificada por la inclusión de la fracción volumétrica de esa dispersión. Se demuestra [18] que la distancia entre partículas L está relacionada con el número de precipitados interceptados por unidad de área por el plano de deslizamiento  $(n_s)$ , a través de la relación:

$$L = \sqrt{\frac{1}{n_s}} \tag{8}$$

la cual es considerada válida solo para pequeñas fracciones En este caso de estudio la composición aproximada del volumétricas, caso común en los aceros microaleados. La acero microaleado al titanio fue: 0.11 % C, 0.18 % Mn y

$$f_a = n_s \left(\frac{\pi x^2}{4}\right) \to \frac{4f_a}{\pi x^2} \tag{9}$$

Siendo asumida una distribución aleatoria de precipitados esféricos, la fracción volumétrica  $(f_v)$  debe ser igual a la fracción de área  $(f_a)$  [9,19]. De lo expuesto, se sustituye 9 en 8 y como consecuencia la expresión 7 se modifica a la conocida expresión  $\sigma_{GL}$  propuesta por Gladman [18], que puede ser utilizada para el cálculo de los incrementos de resistencia (en MPa) para la dispersión aleatoria de precipitados finos en los aceros microaleados:

$$\sigma_{GL} = \left(\frac{8.94 \cdot \sqrt{f_v}}{d}\right) \ln(1640 \cdot d) \tag{10}$$

#### III. APLICACIONES DEL MODELO DE OROWAN-ASHBY

La evidencia experimental registrada en la literatura [20-23] muestra la ocurrencia heterogénea (solamente en una fracción de los granos) de la precipitación interfásica en los aceros microaleados tratados con diferentes esquemas de tratamientos térmicos partiendo de altas temperaturas de solubilización de los elementos microaleantes. Teniendo en cuenta las características de este modo de precipitación se utilizó el modelo de Orowan-Ashby en dos casos de estudio concretos.

El primer caso de estudio fue tomado de los datos experimentales publicados por Freeman & Honeycombe [24] correspondiente a un acero microaleado al titanio, donde conocidas las características de la precipitación interfásica, como tamaño y distancia entre las hileras de las partículas, se pudo justificar el uso del modelo de Orowan-Ashby y de esta forma calcular la fracción de granos que presentaron dicho modo de precipitación.



Figura 1. Correlación entre el endurecimiento por precipitación ( $\sigma_u - \sigma_G = \sigma_p$ ) y el incremento en el límite de fluencia calculado según el modelo de Orowan- Ashby.

0.55 % Ti. Se realizó un tratamiento de solubilización a alta temperatura (1250°C), seguida de transformaciones isotérmicas entre 600 y 850°C. Estos tratamientos térmicos garantizaron que una gran parte de los carbonitruros de titanio precipitaran en la forma interfásica, durante la transformación  $\gamma \rightarrow \alpha$ . Lo anterior mostró que muy poco soluto estaría en solución para precipitar posteriormente en la ferrita, dado la baja solubilidad del titanio con el descenso de la temperatura y tampoco en la fase austenítica por la rapidez en el enfriamiento a las temperaturas de los tratamientos isotérmicos. De este modo, fue posible registrar cambios significativos tanto en los tamaños de partículas como en el espaciamiento entre las hileras de precipitados para los distintos tratamientos isotérmicos y, consecuentemente, diferentes niveles de endurecimiento por precipitación. Los datos relativos a las distribuciones de partículas observadas por Freeman & Honeycombe [24] son presentados en la tabla 1. Además, en las diferentes imágenes de microscopía electrónica de transmisión (campo claro) [24] se muestra que después de los tratamientos isotérmicos, la densidad de dislocaciones se correspondió a la de los aceros recocidos ( $\leq 10^8$  cm<sup>-2</sup>), por lo que la contribución al endurecimiento por dislocaciones fue despreciada.

La figura 1 correlaciona la contribución a la resistencia por precipitación obtenida experimentalmente ( $\sigma_p$ ) con los pronósticos de Orowan – Ashby ( $\sigma_{o-a}$ ). Se verifica una regresión lineal bien ajustada (coeficiente de correlación  $R^2$  = 0.99), mostrando que el modelo de Orowan – Ashby puede ser aplicado con precisión a la estimación del incremento en la resistencia mecánica causado por la precipitación interfásica. Además la excelente correlación lineal, mostrada en la figura 1, entre la contribución al endurecimiento por precipitación determinada experimentalmente y la calculada por el modelo de Orowan-Ashby justifica la despreciable influencia del mecanismo de endurecimiento por dislocaciones.

Se calcula entonces el efecto de la precipitación interfásica, (única forma de precipitación presentada) según el modelo de Orowan-Ashby ( $\sigma_{o-a}$ ) (ecuación 7), sobre la resistencia mecánica para los distintos tratamiento isotérmicos. Los resultados se anexaron a la tabla 1, y ponen de manifiesto que los valores calculados son muy elevados, si son comparados con los resultados experimentales para tal precipitación ( $\sigma_v$ )

La razón de tal discrepancia está asociada al hecho de que en el cálculo realizado se ha considerado que la precipitación interfásica ha ocurrido homogéneamente en todo el volumen del material analizado, lo cual no se corresponde exactamente con la realidad. En este sentido la utilización del modelo de Orowan-Ashby permite calcular la fracción de granos que presentaron la precipitación interfásica para los diferentes tratamientos isotérmicos a través de la relación:

$$\sigma_y = \sigma_G + X_I \cdot \sigma_{o-a} \tag{11}$$

Donde  $\sigma_y$  es el valor experimental del límite de fluencia (MPa),  $\sigma_G$  la contribución a la resistencia mecánica de los efectos combinados de la fricción interna de la red cristalina (tensión de Peierls), composición química del acero y tamaño de grano y  $X_I$  es la fracción de granos que experimentó la precipitación interfásica.

Tabla 1. Parámetros microestructurales y resistencia mecánica del acero microaleado según Freeman & Honeycombe [24]. Contribución al endurecimiento por precipitación según el modelo de Orowan-Ashby. **Leyenda:** T (Temperatura de Transformación), d (Tamaño Medio de Partículas), L (Distancia Media entre Hileras), ( $\sigma_y$ ) (Límite de Fluencia), y  $\sigma_p$  y  $\sigma_{o-a}$  (los endurecimientos por precipitación y calculados por Orowan-Ashby, respectivamente).

Т ⁰С	( <i>d</i> ) [nm]	( <i>L</i> )[nm]	$(\sigma_y)$ [MPa]	$(\sigma_G)$ [MPa]
600	4	12	696	144
650	4	12	667	145
700	4	15	500	117
750	4	18.5	412	120
800	9	36	333	128
850	23	63	225	113

$(\sigma) = (\sigma - \sigma) [MD_2]$	$(\pi)$ [MDa]
$(o_p) = (o_y - o_G) [NIFa]$	$(0_{o-a})$ [MFa]
552	1019
522	1019
383	815
292	661
205	486
112	375

De esta manera se tiene:

$$X_I = \frac{\sigma_y - \sigma_G}{\sigma_{o-a}} \tag{12}$$

La figura 2 muestra la variación de la fracción de granos que presentaron la precipitación interfásica con el cambio de la temperatura de transformación. Así, en la medida que el grado de subenfriamiento aumenta decrece la cantidad mínima de energía necesaria para la formación de los núcleos. En esta situación la difusividad de los átomos de soluto a través de la matriz se dificulta, haciendo que tanto el tamaño como la distancia entre las hileras de partículas decrezca, de modo que el número de sitios preferenciales para la precipitación y la fracción de granos con precipitación interfásica aumente.



Temperatura de transformación Figura 2. Variación de la fracción de áreas (granos) que presentan precipitación interfásica con el aumento de la temperatura de transformación.

Este caso de estudio sólo presentó una única forma de precipitación, la interfásica y precisamente este modo de precipitación fue el único contribuyente al endurecimiento por precipitación. No obstante, la literatura presenta la ocurrencia de otros modos de precipitación tales como la precipitación de carbonitruros sobre las dislocaciones existentes en la matriz ferrítica o sobre sitios preferenciales en la austenita [11,25]. Para esas partículas la aplicación de la expresion 7 del modelo de Orowan – Ashby puede no responder bien cuantitativamente, debido a las dificultades en la obtención de los datos experimentales estadísticamente confiables sobre la distribución de precipitados. Se debe también destacar que en una dispersión heterogénea de partículas existe una enorme dificultad en determinar estadísticamente la distancia media entre los precipitados en un mismo plano de deslizamiento, esto conlleva a un sobreestimado de los resultados previstos por este modelo. De este modo, la modificación propuesta por Gladman -ecuación 10- puede dar resultados más aceptables cuando la precipitación heterogénea ocurre en la austenita o en la ferrita. La determinación de la fracción volumétrica de una distribución heterogénea de partículas es más fácilmente obtenida, dada la frecuencia con que normalmente se manifiesta este tipo de precipitación.

En términos generales un aumento del límite de fluencia en aceros que presentan una distribución de partículas es causado por la interacción de éstas con un arreglo de dislocaciones existentes en la matriz. Algunos autores [26,27] cuestionan el aspecto aditivo de los diferentes mecanismos que actúan en el endurecimiento de los aceros microaleados. En estos materiales, cuando es significativa la densidad de dislocaciones, las pequeñas partículas interactuarán con los defectos cristalinos afectando su distribución y movilidad, esto hace que su densidad y camino libre cambien y como resultado variará la contribución al endurecimiento debido a la densidad de dislocaciones. De manera recíproca, si se altera el arreglo de dislocaciones se cambia significativamente las condiciones necesarias para el endurecimiento por precipitación. En otras palabras: ambos mecanismos (precipitación y dislocaciones) están correlacionados de una forma más simple si se considera en esta interacción la media geométrica de los efectos individuales, en lugar de adoptar una suma aritmética ó pitagórica de éstos.

Un razonamiento similar podría ser aplicado para evaluar la contribución al endurecimiento de aceros microaleados laminados en caliente que manifiesten diferentes modos de precipitación de los carbonitruros (en la austenita, interfásica y sobre las dislocaciones en la ferrita) y donde sea despreciable la contribución al endurecimiento por la interacción de las propias dislocaciones. Cada modo de precipitación tiene sus peculiaridades, induciendo diferencias significativas entre las regiones. De cierta forma esto debe alterar la estructura del arreglo de dislocaciones (baja densidad) y, consecuentemente, la contribución al endurecimiento causado por cada tipo de precipitación en el acero. Tal vez una sumatoria de sus efectos represente un sobrestimado de la resistencia real, siendo necesario considerar la media geométrica entre los distintos modos de precipitación.

Con el propósito de evaluar los efectos interactivos abordados, se analizó un segundo caso de estudio donde el incremento de la resistencia por precipitación es causado por una dispersión de finos carbonitruros de niobio, los cuales precipitaron en diferentes estadíos durante el enfriamiento continuo del acero microaleado (dos modos de precipitación, en la austenita e interfásica).

Tabla 2. Composición química del acero comercial microaleado al Niobio y laminado en caliente, (wt %).

С	Si	Mn	Al	Nb	N	Fe
0.071	0.014	0.68	0.035	0.043	0.0096	Rest

El material utilizado para este segundo caso de estudio fue un acero comercial microaleado al Nb y laminado en caliente hasta un espesor de 10 mm. La composición química del material estudiado y las condiciones del procesamiento industrial se muestran en las tablas 2 y 3. Microscopía óptica y electrónica fueron empleadas para estudiar la microestructura del acero y el origen de la precipitación, así como también las fracciones volumétricas y tamaños de las partículas precipitadas. Esto unido a los ensayos mecánicos de fluencia y a las relaciones empíricas que correlacionan la estructura con las propiedades mecánicas permitieron hacer un estimado cuantitativo de las diferentes contribuciones al endurecimiento del acero, (para más detalles ver [28]).

Tabla 3. Parámetros del procesamiento industrial del acero microaleado al Nb y laminado en caliente. **Leyenda:**  $T_D$  (Temperatura de desbaste),  $T_o$  (Temperatura inicio de laminado final),  $T_f$  (Temperatura fin de laminado final),  $V_o$  (Velocidad de enfriamiento),  $T_B$  (Temperatura de bobinado) y  $\Delta D_f$  (Espesor final).

Acero	$T_D[^{o}C]$		To	[°C]	$T_f[^oC]$	
Nb	1150		1080		890	
$V_e[^{o}C$	[/s]	$T_B[^o$	<i>C</i> ]	$\Delta D_{j}$	$_{f}[mm]$	
10		65	0		10	

Tabla 4. Distribución del Nb(C, N) y estimados del endurecimiento según las expresiones de Orowan-Ashby y Gladman para el acero comercial microaleado al Nb y laminado en caliente [28]. **Leyenda:** d (Tamaño medio de las partículas), x (fracción volumétrica), L (Distancia Media entre Hileras),  $\sigma_{o-a}$  (Endurecimiento Orowan-Ashby) y  $\sigma_{GL}$  (Endurecimiento Gladman).

Orige	en de la p	d [nm]	$x(10^{-4})$	
	γ			1.12
$\gamma$			8 - 12	0.9
Interfásica			7	-
ĺ	$L[\mu m]$	$\sigma_{o-a}$ [MPa]	$\sigma_{GL}$ [MP	a]
			40	
	-	-	24	
	0.06	263	-	

El análisis por microscopía electrónica de transmisión (MET) en laminas finas del acero microaleado logró identificar

dos modos diferentes de precipitación: en la austenita y la interfásica [28]. Las observaciones realizadas en las muestras constataron que la primera tuvo preponderancia en todos los granos analizados, mientras que la precipitación de carbonitruros en forma de hileras solo fue observada en apenas dos regiones de las veinte que fueron cuidadosamente analizadas. La tabla 4 muestra las medidas cuantitativas de las distribuciones de partículas encontradas y sus respectivas contribuciones al endurecimiento. Estas contribuciones al endurecimiento, causadas por la dispersión de precipitados, fueron calculadas según las expresiones de Orowan-Ashby y Gladman, expresiones 7 y 10 respectivamente.



Figura 3. Contraste de dislocaciones en un grano de ferrita poligonal del acero comercial microaleado al Nb y laminado en caliente.

Se determinó experimentalmente (detallado en [28]) para este acero microaleado un incremento en la resistencia por precipitación de aproximadamente 60 MPa. Se consideraron los efectos de los elementos de aleación y el tamaño del grano ferrítico determinado por microscopía óptica y electrónica de barrido (10µm). También en este acero se pudo despreciar la contribución al endurecimiento por dislocaciones pues su densidad en la ferrita poligonal fue la típica de los aceros recocidos  $(\sim 10^8 \text{ cm}^{-2})$  [22] (ver Figura 3). La aplicación del modelo de Gladman permitió estimar el efecto de la dispersión fina de partículas en la austenita ( $\sigma_{GL}$ ), que provocó un aumento aproximado de 64 MPa en el limite de fluencia del acero investigado. La micrografía presentada en la figura 4 muestra un grano con precipitación interfásica, de la cual se puede estimar un tamaño medio de las partículas de 7 nm y una distancia entre las hileras de aproximadamente 0.06  $\mu$ m. Aplicando el modelo de Orowan-Ashby ( $\sigma_{o-a}$ ) para esta dispersión de carbonitruros se tuvo como resultado un incremento de 263MPa en el límite de fluencia.

A pesar del gran incremento que podría ser dado al límite de fluencia por la precipitación interfásica según Tabla 4, ésta tuvo un efecto más limitado, puesto que fue detectada en apenas dos de veinte regiones cuidadosamente observadas al MET. En este sentido, se necesita estimar la probabilidad para la cual este tipo de precipitación puede ocurrir en un volumen dado del material. Una aproximación puede ser hecha, si se determina la distancia entre las hileras de los carbonitruros (L) y el espesor de la lámina fina (t) observada

al microscopio electrónico de transmisión, así:

$$X_{obs} = \left(\frac{L}{t}\right) \cdot X_{real} \tag{13}$$

siendo  $X_{real}$  la fracción de zonas donde la precipitación interfásica debe realmente ocurrir, (L/t) expresa la probabilidad de que esta forma de precipitación sea observada y  $X_{obs}$  corresponde a la fracción de áreas con precipitación observada al MET.



Figura 4. Precipitación interfásica en el acero comercial microaleado al Nb y laminado en caliente.

El espesor de la lámina *t* fue calculada [29] a través de las franjas de espesor obtenidas en el contorno entre dos granos adyacentes. El valor estimado fue aproximadamente de  $0.12\mu m$ , prácticamente el doble de la distancia entre las hileras de carbonitruros. De esta forma, la probabilidad (*L*/*t*) fue de 0.5 *y*, consecuentemente, la fracción de granos con precipitación interfásica estimada en 0.2, dado que  $X_{obs}$  correspondió a 0.1. Así, el incremento en la resistencia mecánica debido a la precipitación interfásica será aproximadamente de 53 MPa.

Teniendo en cuenta este valor de endurecimiento por precipitación interfásica con aquel obtenido por la expresión (10) de Gladman para las partículas originadas en la austenita,  $\sigma_{\gamma} = 64$  MPa, se tiene un aumento en el límite de fluencia de 117 MPa. Este valor, obtenido por la suma aritmética de las contribuciones parciales, obviamente es un sobrestimado respecto al valor de 60 MPa que fue obtenido para este mecanismo de endurecimiento. Considerando la interacción entre las formas de precipitación observadas en el acero microaleado es más factible estimar la media geométrica de las contribuciones parciales por la expresion:

$$\Delta \sigma = (\sigma_{\nu} X_{real} \sigma_{o-a})^{1/2} \tag{14}$$

Que resultó en una contribución al endurecimiento de 58 MPa, un valor más ajustado con los resultados experimentales.

#### IV. CONCLUSIONES

Fue considerada la aplicación del modelo de Orowan-Ashby (tensión de fluencia controlada por la distancia entre partículas) para justificar el endurecimiento por precipitación de carbonitruros en aceros microaleados que presentaron precipitación interfásica. Los resultados permitieron formular las siguientes conclusiones.

- 1. La contribución de la precipitación interfásica al endurecimiento por precipitación puede ser avalada por el modelo de Orowan-Ashby, tomando el espaciamiento entre las hileras como la distancia efectiva entre las partículas.
- 2. A pesar de haber ocurrido en pocas áreas observadas en las muestras, la precipitación interfásica parece contribuir de manera significativa en el aumento de la resistencia mecánica de los aceros microaleados.
- 3. La utilización del modelo de Orowan-Ashby en los aceros microaleados que solo presentaron endurecimiento por precipitación interfásica permitió estimar la fracción de granos que presentó dicho modo de precipitación.
- 4. En un acero comercial microaleado al niobio y laminado en caliente, un aumento del límite de fluencia alrededor de los 60 MPa fue justificado por la media geométrica de las contribuciones al endurecimiento de dos modos de precipitación distintos: precipitación en la austenita durante la laminación y la precipitación interfásica, ocurrida durante la transformación de la austenita en ferrita evidenciando la interacción entre ellos.

#### V. AGRADECIMIENTOS

E.V. Morales agradece a CNPq, CAPES y FAPERJ por las bolsas posdoctorales de estudio en las Universidades UFSCar y PUC-Rio, respectivamente.

REFERENCIAS

- [1] R.W. K. Honeycombe; Scand. J. Metallurgy, 8, 21, (1979).
- [2] K.J. Irvine, T. Gladman, F.B. Pickering; J. Iron Steel Inst., 208, 717, (1970).
- [3] S.S Campos, J. Gallego, E.V. Morales, H.-J. Kestenbach; in 'HSLA Steels 2000', ed. Liu Guoquan et. al., 629, Beijing, Metallurgical Industry Press, (2000).
- [4] H.-J. Kestenbach, J. Gallego; Scr. Mater., 44, 791, (2001).
- [5] A.J. De Ardo; Mater. Sci. Forum, 15, 284, (1998).
- [6] E.V. Pereloma, B.R. Crawford, P.D. Hodgson; Mater. Sci. Eng. A299, 27, (2001).

- [7] L.M. Brown, R.K. Ham; Strengthening Methods in Crystals, eds. A Kelly and R.B. Nicholson, London Elsevier, 9, (1971).
- [8] R.B. Nicholson; Effect of Second Phase Particles on the Mechanical Properties of Steel, J. Iron Steel Inst. London, 1, (1971).
- [9] T. Gladman; The Physical Metallurgy of Microalloyed Steels, The Institute of Materials, London, 49, (1997).
- [10] E. Orowan; Internal Stress in Metals and Alloys. The Institute of Metals, London, 451, (1948).
- [11] H.-J. Kestenbach, E.V. Morales; Acta Microscopica, 7(1), 22, (1998).
- [12] E.V. Morales, J. Gallego, H.-J. Kestenbach; Phil. Mag. Lett., 83(2), 79, (2003).
- [13] R.M. Brito, H.-J. Kestenbach; J. Mater. Sci., 16, 1257, (1981).
- [14] M.F. Ashby; Acta Metall., 14, 679, (1966).
- [15] S.A. Argon; Physics of Strength and Plasticity, MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 113, (1969).
- [16] U.F. Kocks; Phil. Mag. 13, 541, (1966).
- [17] A.J.E. Foreman, M.J. Makin; Phil. Mag. 14, 911, (1966).
- [18] T. Gladman, D. Dulieu, I.D. McIvor; in Microalloying'75, New York, Union Carbide, 32, (1977).
- [19] J.W. Martin; Micromechanisms in Particle-Hardened Alloys, Cambridge university Press, U.K., 40, (1977).
- [20] W.B. Morrison; J. Iron Steel Inst., 201, 317, (1963).
- [21] A.T. Davenport, L.C. Brossard, R.C. Miner; J. Met., 27, 21, 1975.
- [22] S.S Campos, E.V. Morales, H.-J. Kestenbach; Metall. Mater. Trans. A., 32, 1245, (2001).
- [23] H.-J. Kestenbach, S. S. Campos, E. V. Morales; Mater. Sci. Techn., 22,(6), 615, (2006).
- [24] S. Freeman, R.W.K Honeycombe; Metal Science, 2, 59, (1977).
- [25] A. Itman, K.R. Cardoso, H.-J. Kestenbach; Mater. Sci. Technol., 13, 49, (1997).
- [26] J.C. Williams, A.W. Thompson; Metallurgical Treatises, USA-China Bilateral Conference, eds. J.K. Tien and J.F. Elliot, Nov., 13, Beijing, 487, (1981).
- [27] L. Jian, S. Fuyu, X. WenChong; Scr. Metall. Mater., 24(7), 1393, (1990).
- [28] E.V. Morales, H.-J. Kestenbach; Rev. Metal Madrid; 34(6), 488, (1998).
- [29] H.-J. Kestenbach, W.J. Botta Filho; Microscopia Eletrônica: Transmissão e Varredura, São Paulo, SP, Associação Brasileira de Metalurgia e Materiais, 80, (1994).

## THE LONG-TAIL DISTRIBUTION FUNCTION OF MUTATIONS IN BACTERIA LA FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN DE COLA LARGA PARA LAS MUTACIONES EN BACTERIAS

#### Augusto González $^{\dagger}$

Instituto de Cibernética, Matemática y Física, Calle E 309, Vedado, CP 10400, La Habana, Cuba, agonzale@icimaf.cu<sup>†</sup> † corresponding author

Recibido 24/7/2015; Acepta	ado 15/10/2015	
		_

We use Levy flights in the mutations space to model the temporal	Los vuelos de Levy en el espacio de mutaciones son utilizados
evolution of bacterial DNA. The model parameters fit the so-called	para modelar la evolución temporal del ADN en bacterias. Los
Long Time Evolution Experiment on E. coli.	parámetros en el modelo se ajustan a las observaciones del
	Experimento de Evolución a Largo Plazo con E. coli.

PACS: Levy flights 05.40.Fb; Random Processes 05.40.-a; DNA 87.14.gk

#### I INTRODUCTION

Living creatures are complex systems that use a huge amount of information and elaborated control mechanisms. A typical mammalian cell, for example, synthesizes around 10,000 proteins, which concentrations should remain under very precise limits. The information for life is encoded in the DNA molecule.

There are many natural or external factors causing "damages" to the DNA. During DNA replication, for example, sometimes there are "errors". If these damages or errors are compatible with life, and are not corrected by the DNA repair mechanisms [1], then they survive in the cellular descendants after mitosis. In this case, we speak about mutations. Evolution proceeds precisely through natural selection among the mutated individuals.

Bacteria are unicellular organisms well suited to study mutations under controlled conditions. Their circular DNA molecule contains a few millions bases, 1000 times shorter than human DNA. On the other hand, the rate of cellular divisions is such that we can observe a few bacterial generations in the course of a day. In the experiment described in Ref. [2], for example, the authors reached the milestone of 20,000 generations in around 8 years, something that for humans would require about 400,000 years.

A careful examination of DNA mutations shows that we shall distinguish between local and non-local events. Single-point mutations are base replacements at a single point of the DNA molecule [3]. On the other hand, nonlocal changes involve rearrangements of a segment of the molecule. If we assume that there is a variable, X, measuring changes in the DNA, then a single-point mutation would correspond to a small variation of X, whereas a non-local change shall be described as a large variation of X. Chromosomal rearrangements are typical examples of non-local DNA changes [4].

Modeling mutations requires, naturally, random processes. The location in the DNA molecule at which the mutation

occurs is random, as it is the "magnitude" of the mutation. In terms of the X variable, mentioned above, single-point mutations could be described as a short-amplitude Brownian motion [5]. But we should add the possibility of large-amplitude jumps. The combination of a small-amplitude Brownian motion and large-amplitude jumps makes a Levy flight [6], a process never used, to the best of the author's knowledge, to model mutations.

The purpose of this paper is to present a model, based on Levy flights, for mutations in bacteria and to adjust the model parameters in order to qualitatively fit the data presented in Ref. [2].

#### II THE LONG TIME EVOLUTION EXPERIMENT

I recall the extremely interesting experiment with *E. coli*, conducted by Prof. R. Lenski and his group [2, 7], and running already for more than 27 years. Among the reported results, I use the following [8]:

1. In a culture of bacteria, after 20,000 generations, around  $3 \times 10^8$  single point mutations in the DNA are registered. These are local modifications of the DNA chain. I notice that the number of bacteria undergoing continuous evolution is around  $5 \times 10^6$ .

2. They measure also the frequency of mutations involving rearrangements in segments of the DNA. In particular, mutations in which the repair mechanisms are damaged and the mutation rate increases 100 times. This mutator phenotype becomes dominant in two out of twelve cultures (probability 1/6) after 2500 - 3000 generations, in a third culture (cumulative probability 1/4) after 8,500 generations, and in a fourth culture (cumulative probability 1/3) after 15,000 generations.

## III THE ACCUMULATIVE CHARACTER OF MUTATIONS

In this model, the time evolution of cells defines trajectories, as schematically represented in Fig. 1, where two of these trajectories are drawn as red lines. The line joins one cell with its daugther at each step. We are interested only in continuosly evolving trajectories, that is those who always pass to the next day of evolution. Notice that the number of evolution trajectories coincides with the number of cells at the begining of each day,  $N_{cell}$ .

The idea about trajectories in the evolution of cells means that there are Markov chains [9] of mutations, where the change in the DNA of a cell at step i + 1,  $x_{i+1}$ , comes from the change in the previous step plus an additional modification:

$$x_{i+1} = x_i + \delta \tag{1}$$

Horizontal DNA transfer is not considered.



Figure 1. Schematic representation of the evolution of bacteria in the Long Time Evolution Experiment. Every day, the cells experience a clonal expansion in which the initial number  $N_{cell} \approx 5 \times 10^6$  is raised 100 times. However, only  $N_{cell}$  bacteria pass to the next day. Two evolution trajectories are marked by red dashed lines.

#### IV MEASURING CHANGES IN THE DNA

A single strand of E. Coli DNA contains around  $4.6 \times 10^6$  bases of a four letter alphabet: A, G, C, and T. [10] In order to measure changes in the DNA, one may use a variable similar to that one of paper [11].

First, we define an auxiliary variable at site  $\alpha$  in the molecule:  $u_{\alpha}(G) = 3/8$ ,  $u_{\alpha}(A) = 1/8$ ,  $u_{\alpha}(T) = -1/8$ , and  $u_{\alpha}(C) = -3/8$ . Then, we define a walk along the DNA:

$$y(\beta) = \sum_{\alpha=1}^{\beta} u_{\alpha}.$$
 (2)

As a function of  $\beta$ , the variable *y* draws a profile of the DNA molecule, and modifications can be measured as:  $X(\beta) = y(\beta) - y_0(\beta)$ . where *y* correspond to the mutated DNA, and  $y_0$  – to the initial configuration. Of course, there are so many  $X(\beta)$ , five millions, that they are not of practical

use. The strategy could be to use variables measuring global changes or distances to the original function:

$$X = \sum_{\alpha=1}^{L} (u'_{\alpha} - u_{\alpha}), \tag{3}$$

$$X^{(1)} = \sum_{\alpha=1}^{L} \alpha (u'_{\alpha} - u_{\alpha}),$$
(4)

where  $X^{(2)}$  would be (the second moment), etc. *L* is the length of the molecule. The Shannon informational entropy [12] could also be of use.

In what follows, we shall assume that mutations are well characterized by a few global variables.

#### V LEVY MODEL OF MUTATIONS

The  $\delta$  term in Eq. (1) represents mutations at step i + 1. It may come from a partially repaired damage in the DNA that is fixed after replication, or from an error in the replication process. It should be stressed that both the repair mechanisms and the replication process guarantee very high fidelities. The error introduced by the latter, for example, is around one mistaken base per 10<sup>9</sup> bases in the human DNA strand [3].



Figure 2. (Color online) Schematic representation of a single evolution trajectory in a two-dimensional mutation space. The starting point is X = 0. In the mutation space, I distinguished regions in which the DNA repair mechanism is active or damaged.

Let us stress once again that  $\delta$  is not the damage caused by endogenous or external factors, but the resulting modification after the action of the repair mechanisms. It is known, for example, that ionizing radiation may cause double strand breaks in the DNA [13]. These damages are very difficult to repair [3]. The repair mechanism itself may introduce large changes in the resulting DNA composition after a double strand break event.

My proposal for  $\delta$  is the following:  $\delta = \delta_B + \delta_{LJ}$ . The  $\delta_B$  component corresponds to a Brownian motion with maximal amplitude  $D_B$ . Notice that  $D_B = 1$  would mean roughly a change of basis in each replication step because  $u_{\alpha}(G) - u_{\alpha}(C) = 3/4$ . This Brownian motion introduces local modifications in the DNA. After  $N_{step}$  replication steps, the characteristic dispersion of a trajectory due to this Brownian

motion (something like the radius of the colored region near the origin in Fig. 2) is  $D_B \sqrt{N_{step}}$ . [5]

The large-jump component of  $\delta$ ,  $\delta_{LJ}$ , on the other hand, is modeled with the help of rare events with total probability p << 1, and a probability density proportional to  $1/\delta_{LJ}^2$ , where the amplitude ranges from  $D_B$  to infinity (in practice, I will introduce a cutoff,  $D_{max}$ ). The combination of the Brownian motion and the large amplitude jumps leads to Levy flights [6] in the mutation space, schematically represented in Fig. 2.

Notice that the distribution function associated to Levy flights is a fat- or long-tail one. This fact could be related to the long range correlations observed in the walks along the DNA [11].

#### VI THE LONG TAIL DISTRIBUTION FUNCTION OF MUTATIONS

Four parameters enter my oversimplified Levy model of mutations:  $N_{cell}$ ,  $N_{step}$ ,  $D_B$  and p. As mentioned above,  $N_{cell} = 4.6 \times 10^6$ . On the other hand,  $N_{step}$  is the number of replication steps along a trajectory.

 $D_B$  is the amplitude of the Brownian motion. It shall be determined from the observed number of single point mutations (SPM) after 20,000 generations. The number of SPMs per bacteria is  $3 \times 10^8/(4.6 \times 10^6) \approx 65$ . The characteristic dispersion of the trajectory, on his side, is the Brownian radius,  $\sqrt{N_{step}} D_B \approx 140 D_B$ . In order to estimate the equivalent number of SPM, I divide the latter by the mean deviation involved in a SPM, that is 5/12. Notice that u(G) - u(A) = 1/4, u(G) - u(T) = 1/2, etc. Thus,  $65 = 140 D_B/(5/12)$ , and  $D_B \approx 0.19$ .



Figure 3. (Color online) The average cumulative probability of mutations, P(|X| > Z), for a single evolution trajectory after 3000 generations. Points come from the numerical simulations, whereas the red solid line is a 1/Z fit to the tail. The Brownian radius,  $D_B \sqrt{N_{step}}$ , is marked by a dashed line.

Finally, the parameter *p* is fixed to  $1.3 \times 10^{-5}$ . Below, I shall come back to the way of determining it.

In the simulations, all of the  $N_{cell}$  trajectories start at X = 0. In any replication step, mutations are given by Eq. (1), where  $\delta$  contains both the Brownian and the large-amplitude components.

The probability distribution function for mutations in a cell, P(X), is the probability that a cell arrives at the end point with an amplitude *X*. For convenience, I compute not P(X), but the cumulative probability distribution, P(|X| > Z), which is shown in Fig. 3 for  $N_{step} = 3000$ .

The Brownian radius,  $\sqrt{N_{step}} D_B \sim 10.4$ , concentrating most of the points, is apparent in the figure. In addition, the tail can be fitted by a 1/Z dependence. The coefficient is roughly  $N_{step}D_B p$ .

The data on the mutator phenotype is to be used in order to fix the slope in the tail. I assume that the repair mechanisms are related to a coding region in the DNA of length *l*. The mechanisms are damaged when this region suffers modifications greater than a given  $X_u$ . The cumulative probability can be estimated as  $N_{cell} P(|X| > X_u)$ . Using the functional dependence in the tail, I get:

Cum. Prob. 
$$\approx N_{cell} \frac{N_{step} D_B p}{X_u} \frac{l}{L} = a N_{cell} N_{step}.$$
 (5)

So far, precise values for *l* and  $X_u$  were not available. Reasonable numbers are  $l/L \approx 10^{-2}$ ,  $X_u/L \approx 10^{-3}$ . From the observed probabilities, I get  $a \approx 5.4 \times 10^{-12}$ , as shown in Fig. 4, from which it follows that  $p = 1.3 \times 10^{-5}$ .

The asymptotic formula for events in the tail of the distribution, Eq. (5), is valid no matter how precise are l and  $X_{unrep}$ .



Figure 4. (Color online) Cumulative probability of the mutator phenotype in the Long Time Evolution Experiment. The line is a fit according to Eq. (5).

#### VII MUTATIONS AND NATURAL SELECTION

Let me stress that in Fig. 4 probabilities are measured in a set of 12 cultures. Thus, one expects errors of the order of  $1/\sqrt{12} \approx 0.3$ . In addition, Lenski and his group report not the occurrence of the mutation, but the moment at which the phenotype becomes dominant in a population. In this process, natural selection plays a major role.

In both the DNA-repaired and DNA-unrepaired regions of the mutation space, there exist points with evolution advantage. These points act as attractors in the mutation space.

Natural selection may be included in my model by introducing a relative fitness parameter, w. [14]  $w_r = 1$  and  $w_u$  apply to regions of radius three around the centers of the DNA-repaired and DNA-unrepaired areas. Out of these regions,  $w_o = 0.7$ . I introduce a clonal expansion phase in which the number of cells increases 100 times, as in the Lenski experiment, but only  $N_{cell}$  bacteria pass to the next step. The bacteria are selected according to the conditional probability  $w/(w_o + w_r + w_u)$ . Results are to be published elsewhere.

#### VIII LEVY MODEL OF CANCER

With appropriate parameters, my Levy model can also be applied to mutations in stem cells and, in particular, to the analysis of lifetime cancer risk in different tissues [15] with the help of a formula like Eq. (5). Results are to be published elsewhere. [16]

I would like to stress only the intriguing fact that in cases, like the ovarian germinal cell cancer, where physical barriers act as protection, and the action of the immune system is partially depressed, the slope *a* takes values similar to the number obtained for bacteria.

#### IX ACKNOWLEDGEMENTS

The author acknowledges support from the National Program of Basic Sciences in Cuba, and from the Office of External Activities of the International Center for Theoretical Physics (ICTP).

#### REFERENCES

[1] Mechanistic studies of DNA repair, Nobel Prize in Chemistry 2015, https://www.kva.se/globalassets /priser/nobel/ 2015/kemi/sciback-ke-en15.pdf

- [2] R.E. Lenski, Summary data from the long -term evolution experiment, http://myxo.css.msu.edu/ecoli/ summdata.html
- [3] Molecular Biology of the Cell, B. Alberts, A. Johnson, J. Lewis, M. Raff, K. Roberts, and P. Walter, New York: Garland Science, 2002.
- [4] A.J.F. Griffiths, W.M. Gelbart, J.H. Miller, et al., Modern Genetic Analysis, W. H. Freeman, New York, 1999. http://www.ncbi.nlm. nih.gov/books/NBK21367/
- [5] A. Einstein, Investigations on the theory of the Brownian movement, Dover, 1956.
- [6] Levy flights and related phenomena in Physics, Eds. M.F. Shlesinger, G. Zaslavsky, and U. Frish, Lecture Notes in Physics, Vol. 450, Springer, Berlin 1995.
- [7] A brief description can also be found in A. Gonzalez, Rev. Cub. Fis. 31, 71 (2014).
- [8] R.E. Lenski, Phenotypic and genomic evolution during a 20000 generation experiment with the bacterium E. Coli, in J. Janick, Ed., Plant Breeding Reviews, Vol. 24, Part 2, page 225, 2004.
- [9] V.S. Koroliuk, N.I. Portenko, A.V. Skorojod, and A.F. Turbin, Handbook on probability theory and mathematical statistics, Nauka, Moscow, 1978.
- [10] F.R. Blattner, G. Plunkett, C.A. Bloch, et. al., The complete genome sequence of Escherichia Coli K-12, Science 277, 1453 (1977).
- [11] C.-K. Peng, S.V. Buldyrev, A.L. Goldberger, et. al., Physica A 191, 25 (1992).
- [12] T. D. Schneider. Information and entropy of patterns in genetic switches. In G. J. Erickson and C. R. Smith, Eds., Maximum-Entropy and Bayesian Methods in Science and Engineering, volume 2, pages 147, Dordrecht, Kluwer Academic, 1988.
- [13] Leon Mullenders, Mike Atkinson, Herwig Paretzke, Laure Sabatier and Simon Bouffler, Nature Reviews Cancer 9, 596 (2009).
- [14] H. Allen Orr, Nature Reviews Genetics 10, 531 (2009).
- [15] C. Tomasetti and B. Vogelstein, Science 347, 78 (2015); Supplementary materials: www. sciencemag.org/content/347/6217/78/suppl/
- [16] A. Gonzalez, Levy model of cancer, arXiv.org: 1507.08232.

## COMPOSITO DE CuO/TIO<sub>2</sub> OBTENIDO UTILIZANDO UNA NUEVA Y SENCILLA TÉCNICA CuO/TIO<sub>2</sub> COMPOSITE OBTAINED USING A NEW AND SIMPLE TECHNIQUE

F. Forcade<sup>a</sup>, B. González<sup>a</sup>, R. Snyders<sup>b,c</sup>, G. Guisbiers<sup>b,c</sup>, S. Santana<sup>d</sup> y E. Vigil<sup>a,d†</sup>

a) Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, Cuba

b) Química de las Interacciones Plasma-Superficie, Centro de Investigaciones en Materiales y Polímeros (CIRMAP), Universidad de Mons, Bélgica

c) Centro de Investigaciones Materia Nova, Universidad de Mons, Bélgica

d) Facultad de Física, Universidad de La Habana, Cuba, evigil@fisica.uh.cu<sup>+</sup>

+ autor para la correspondencia

Recibido 10/2/2015; Aceptado 28/10/2015

Actualmente existe interés en la interfaz tridimensional CuO/TiO2 por sus posibles aplicaciones en la conversión de la energía solar. Se utiliza una técnica sencilla para crecer óxido de cobre por deposición de baño químico dentro de los mesoporos de una capa nanocristalina de TiO2. La estructura obtenida constituye una interfaz tridimensional CuO/TiO2. Se utilizaron soluciones acuosas de formiato de cobre (II) y acetato de cobre (II) como precursores del óxido de cobre. Se presentan los resultados del análisis estructural y morfológico de estas capas. Estos se obtuvieron con las técnicas de microscopía electrónica de barrido, perfilometría, espectroscopía UV-visible, micro-Raman y difracción de rayos X. Los resultados evidencian la presencia de nanocristales de CuO cuando se emplea una solución acuosa de formiato cúprico como precursor. Sin embargo, el CuO no es cristalino cuando se utiliza la solución de acetato cúprico como precursor.

Interest exists in the three-dimensional interface CuO/TiO2 due to its possible applications for solar energy conversion. A simple technique is used to grow copper oxide by chemical bath deposition inside the mesopores of the nanocrystalline TiO2 layer. The resulting structure constitutes a three-dimensional interface CuO/TiO2. Aqueous solutions of copper (II) formate and copper (II) acetate were used as copper oxide precursors. Results of the structural and morphological analysis are presented. They were obtained using scanning electron microscopy, profilometry, UV-visible spectroscopy, micro-Raman and X-ray diffraction. Results show the presence of CuO nanocrystals when an aqueous solution of cupric formate is employed as precursor. But CuO is not crystalline in composites obtained using the cupric acetate solution as precursor.

PACS: Nanocrystalline material fabrication, 81.07.Bc; Optical properties of nanocomposites, 78.67.Sc; Films structure and morphology, 68.55.-a.

#### I. INTRODUCCION

En la actualidad las interfaces tridimensionales nanoestructuradas son muy estudiadas por sus posibles aplicaciones. Es evidente que el área real de la superficie de nanotubos o nanocilindros es mucho mayor que el área aparente. También lo es cuando nanopartículas en contacto entre sí forman una estructura mesoporosa. En todas estas estructuras, el área real resultante puede ser considerada como una interfaz tridimensional plegada dentro del volumen de la capa.

La interfaz CuO/TiO<sub>2</sub> ha sido reportada anteriormente para la conversión de la radiación solar [1–3], sensores [4] y fotocatálisis [5,6]. Se han estudiados diferentes tecnologías para crecer tales interfaces: impregnación por fase líquida [1–3,5,6] sol-gel [7] y fotolectroquímica [8,9]. Por otra parte, la bibliografía muestra indefiniciones respecto a la interfaz CuO/TiO<sub>2</sub>. Por ejemplo, existen discrepancias con relación al tipo y al valor de la banda prohibida del CuO [10–14]. Además se han reportado diferentes valores para la posición relativa de su banda de conducción respecto al vacío [11,13] (y sus referencias), siendo posible que la banda de conducción del CuO esté por encima de la del TiO<sub>2</sub>. Por lo tanto, es posible que la interfaz CuO/TiO<sub>2</sub> funcione mejor en convertir la radiación solar que la de Cu<sub>2</sub>O/TiO<sub>2</sub> debido a su menor

ancho de la banda prohibida.

En este trabajo se reporta un nuevo y sencillo método para depositar CuO dentro de una matriz mesoporosa de TiO<sub>2</sub>. Una ventaja adicional de esta relativa a otras interfaces tridimensionales que se utilizan para la conversión de la energía solar en electricidad o energía química, es que los óxidos empleados son inocuos. La técnica propuesta está diseñada para que ocurra la penetración completa del CuO en la capa mesoporosa de TiO<sub>2</sub>. Depositar dentro de los intersticios nanométricos de TiO<sub>2</sub> es difícil de lograr con la mayoría de las técnicas de deposición usadas para obtener las estructuras tridimensionales; debido a que se cubre la superficie, se obstruyen los poros y se logra muy poca penetración.

Se analizan los resultados de la técnica propuesta empleando dos precursores diferentes: formiato cúprico y acetato cúprico. Para analizar la morfología de la superficie externa se utiliza microscopía electrónica de barrido (SEM). Con ayuda de la espectroscopía UV-visible y la perfilometría se comparó la absorción resultante al utilizar los diferentes precursores y se determinó el coeficiente de absorción efectivo. La utilización de la difracción de rayos X (DRX) y la técnica de micro-Raman, permitió el análisis estructural de las capas.

#### II. DESCRIPCIÓN EXPERIMENTAL

#### II.1. Obtención de la capa mesoporosa de CuO/TiO<sub>2</sub>

Todas las capas nanoestructuradas de TiO2 utilizadas en este trabajo fueron depositadas mediante la técnica conocida como "doctor blade" utilizando el nanopolvo comercial de TiO<sub>2</sub> Degussa P25 (el tamaño medio de los nanocristales es de 25nm) [15]. Las capas se depositan sobre un vidrio óptico utilizando esta técnica y se secan al aire. Posteriormente se tratan térmicamente en aire durante una hora a  $450^{\circ}$ C.



Figura 1. Obtención del nanocomposito CuO/TiO2. (a) Capa mesoporosa de TiO2 obtenida por la técnica "doctor blade". (b) Inmersión de la capa mesoporosa en el precursor. (c) Capa final después del tratamiento térmico.

Para obtener el composito de CuO/TiO<sub>2</sub>, las películas porosas de TiO<sub>2</sub> se sumergen en la solución precursora durante 18 horas para que esta penetre completamente en la capa mesoporosa de TiO<sub>2</sub> [8] como se observa en la figura 1b. En la Tabla 1 se presentan las soluciones precursoras utilizadas. Una vez embebida la muestra se retira, se seca la superficie con un papel absorbente y se le da un tratamiento térmico durante 3 horas a 500°C. En este proceso se obtiene el CuO producto de la evaporación del H<sub>2</sub>O y la descomposición de la sal de Cu (II). Se espera que una cantidad pequeña de nanocristales, nanopartículas amorfas o una capa muy delgada de CuO, se deposite en los poros originando el cambio de coloración en la capa nanoestructurada de TiO<sub>2</sub> (ver figura 1a y 1c).

Tabla 1. Muestras analizadas

Tipo de	Soluto usado en la	Concentración
muestra	solución acuosa	[mm]
160A	acetato de Cu(II)	160
	$(Cu(CH_3COO)_2)$	
40A	acetato de Cu(II)	40
	$(Cu(CH_3COO)_2)$	
20A	acetato de Cu(II)	20
	$(Cu(CH_3COO)_2)$	
160F	formiato de Cu(II)	160
	(Cu(HCOO) <sub>2</sub> )	
40F	formiato de Cu(II)	40
	(Cu(HCOO) <sub>2</sub> )	

#### II.2. Caracterización

Para conocer la morfología de la superficie de las muestras, estas fueron observadas por microscopía electrónica de

barrido (SEM) empleando un microscopio electrónico de barrido Philips XL 20.

El espesor de las películas se determinó utilizando un perfilómetro Dektak 150. La presencia de CuO y las propiedades ópticas de las películas se determinaron a partir de los experimentos de transmitancia con un espectrofotómetro UV-VIS-NIR Cary 5G de doble haz en un rango espectral de 200 hasta 1300nm.

La estructura cristalina de las capas fue determinada por los patrones de DRX en el rango de:  $10^{\circ} < 2\theta < 60^{\circ}$ , con un equipo Empyrean Panalytical. La radiación utilizada corresponde a la línea K $\alpha$  del cobre ( $\lambda = 1.5406$ Å). El software usado para el análisis por DRX fue el HighScore versión 3.0 (2012). Todos los espectros Raman se midieron usando un sistema de micro-Raman Bruker Senterra cuya fuente de excitación es un láser de Nd:YAG ( $\lambda = 532nm$ ).

#### III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Utilizando SEM se analizaron las superficies de muestras que no se secaron con papel absorbente antes del tratamiento térmico que se aplica para descomponer la sal de Cu(II). En las imágenes correspondientes a las muestras tipo 160F y 40F en la figura 2 se aprecian partículas cuyos bordes obedecen a planos cristalinos.



Figura 2. Imágenes de las superficies observadas mediante SEM para las muestras tipo F con capas mesoporosas CuO/TiO2 estudiadas. En estos casos no fue eliminada de sus superficies la solución que las moja cuando se extraen de la solución precursora.

Para las muestras del tipo 40A y 160A (figura 3) se observa que las partículas de óxido de cobre en la superficie son menores. Las imágenes SEM indican una mayor tendencia del CuO a solidificar en forma cristalina cuando se utiliza la solución de formiato cúprico como precursor. A partir de estas observaciones, se introdujo el secar las muestras para que no quedaran restos de solución precursora sobre la superficie de las capas antes del tratamiento térmico.



Figura 3. Imágenes de las superficies observadas mediante SEM para las dos muestras tipo A con capas mesoporosas CuO/TiO2 estudiadas. En estos casos no fue eliminada de sus superficies la solución que las moja cuando se extraen de la solución precursora.

Después del tratamiento térmico, el color azul claro de las muestras (debido a la sal de Cu(II) dentro de los poros de la capa de TiO<sub>2</sub>) cambió a marrón indicando la descomposición de las sales de Cu(II). La observación visual de las muestras reveló que para una mayor concentración de la solución precursora, las muestras tienden a ser más oscuras. Para analizar la presencia del óxido de cobre depositado dentro de las capas mesoporosas de TiO<sub>2</sub> se realizaron experimentos de transmitancia de la luz. Las muestras tienen distintos espesores, por tanto las más gruesas deben retener una mayor cantidad de solución precursora dentro de sus poros y presentar una mayor absorción de las capas y a partir de la transmitancia de las mismas se determinó un coeficiente de absorción efectivo  $\alpha(hv)$  según la expresión:

$$\alpha h\nu = \frac{1}{t} \ln \frac{1}{T(h\nu)} \tag{1}$$

En esta expresión t es el espesor de la muestra y T(hv) es la transmitancia medida en el espectrofotómetro UV-visible cuando se toma como blanco al sustrato (vidrio óptico). Se conoce que, en el borde de absorción, la dependencia de este fenómeno con la energía de los fotones hv (o sea con la longitud de onda) es mucho más fuerte que la dependencia de la reflexión superficial y la dispersión con la longitud de onda. Además, la incidencia normal sobre la superficie de la muestra disminuye las pérdidas por reflexión especular. Teniendo en cuenta estas observaciones  $\alpha(h\nu)$ se emplea como un coeficiente de absorción efectivo para comparar las muestras entre sí. Este coeficiente efectivo no es completamente independiente del espesor de la muestra debido a la dispersión de la luz dentro de la misma. Al valor del coeficiente de absorción hallado contribuyen la absorción del CuO y la absorción de la capa mesoporosa de TiO<sub>2</sub>. Esta es despreciable para las regiones del espectro con energías muy inferiores al gap del TiO<sub>2</sub> ( $E_g = 3, 2eV$  para anatasa y  $E_g$  = 3.0eV para rutilo) donde se encuentra el borde de absorción del óxido de cobre.

En la figura 4 se observa la dependencia con la energía de los fotones del coeficiente efectivo espectral para los 5 tipos de muestras estudiadas. En la figura 4 se evidencia que las muestras obtenidas usando soluciones precursoras de Cu (II) tienen un incremento de la absorción para energías más bajas, es decir para las mayores longitudes de onda, en comparación con la muestra de TiO<sub>2</sub>. En este intervalo espectral el TiO<sub>2</sub> no muestra absorción de la luz debido al valor del ancho de banda prohibida de la anatasa y del rutilo. Se observan máximos y mínimos producto del fenómeno de la reflexión en una capa delgada.



Figura 4. Espectros del coeficiente efectivo de absorción óptica para los diferentes tipos de muestras analizadas. Se muestra también el espectro del coeficiente efectivo de absorción óptica de una capa de TiO2.

Si se compara la absorción de las muestras teniendo en cuenta las distintas concentraciones, no se observa una dependencia lineal como podía esperarse. Esto último puede atribuirse a que la concentración del óxido depositado esté determinada por la adsorción de las moléculas de la sal de Cu (II) en las paredes de los poros durante el tiempo de inmersión. Consecuentemente debe ocurrir un proceso de difusión de las sales en solución hacia el interior de los poros; dependiendo precursora y tendiente a una saturación.

Es conocida la siguiente expresión para los cristales semiconductores:

$$(\alpha(h\nu) \cdot h\nu)^{n/2} = C(h\nu - E_g)$$
<sup>(2)</sup>

Al graficar la parte izquierda de la expresión 2 en función de hv, cuando se obtiene un ajuste lineal para n = 1, se está en presencia de un material de gap indirecto; mientras que, para un material de gap directo, se obtiene un ajuste lineal cuando n = 4. Lo anterior es válido para los cristales semiconductores cuya estructura cristalina presenta una banda prohibida de energía o gap. En el inserto de la figura 4 se graficó la expresión 2 para las muestras obtenidas utilizando el formiato de Cu(II) como precursor. Estas son las que presentan un borde de absorción (ver figura 4) que indica la presencia de una estructura cristalina ordenada y la existencia de una banda prohibida de energía. Se obtuvo un ajuste lineal para n = 4. O sea, se obtiene que el óxido de cobre tiene un gap directo con valor de energía  $E_g = 1.4$ eV. Un valor de  $1.35 < E_g < 1.44$ eV ha sido reportado por diferentes autores para el óxido cúprico (CuO) [16-18]. La presencia del óxido cúprico es esperada del diseño del experimento en el que se descomponen las sales las sales de Cu(II) y al no existir condiciones para una reacción de reducción.



Figura 5. Patrón de difracción de rayos X correspondiente a una muestra obtenida a partir de una solución acuosa de formiato de cúprico 160mM como precursor.

El valor de  $E_g$  alrededor de 1.4eV también se observa de la posición del borde de absorción en la figura 4 para las muestras obtenidas utilizando el formato cúprico. Se puede explicar que no se observe el borde de absorción para las muestras en que se utilizó la solución de acetato cúprico como precursor por la absorción debida a una estructura desordenada o amorfa. O sea, no existe una banda prohibida porque no existe el orden que corresponde a una fase cristalina. Esto se corroboró con el análisis por DRX. Se confirma la presencia de picos de CuO cuando se emplea el formiato cúprico como precursor y para ambas concentraciones de este; aunque los máximos son más intensos cuando se utiliza formiato cúprico 160 mM (ver figura 5). Para las capas obtenidas con acetato cúprico solamente se observan picos correspondientes a la anatasa y al rutilo. La ausencia de los picos de difracción del CuO confirma el que sea desordenado y explica las diferencias

este fenómeno no solo de la concentración de la solución de la absorción de las muestras para los valores de energía inferiores al gap en la figura 4.



Figura 6. (a) Imagen química que indica diferencias en la composición superficial en la capa 160F. (b) Arreglo utilizado para la selección de puntos en la imagen química. (c) Espectros Raman correspondientes a los dos puntos diferentes de la superficie de las capas hechas a partir de formiato cúprico.

El equipo de DRX empleado utiliza la expresión de Scherrer para, en dependencia de la muestra analizada, dar el diámetro  $\phi$  de las cristalitas o de los nanocristales. Para ello utiliza el denominado "ancho completo a la mitad del máximo", F.W.H.M., por sus siglas en inglés. Se utilizó la línea correspondiente al plano (-111) del CuO. El equipo halla un valor  $\phi = 35$ nm cuando la concentración de la solución de formiato cúprico es 40mM y  $\phi = 43$ nm cuando esta es de 160mM. Esto implica que la masa de los cristales de CuO es mayor que la masa que se habría formado a partir de las sales de Cu (II) contenida en el volumen de un poro. Por ejemplo, suponiendo un poro esférico de 40 nm de diámetro lleno de solución de formiato de Cu(II), se formarían 2.67 \* 10<sup>-19</sup>g de CuO. Sin embargo, la masa de un cristal de óxido de Cu(II) de este diámetro es 2.12 \* 10<sup>-16</sup>g. Se reafirma que durante el tiempo de inmersión el soluto en las soluciones precursoras se adhiere a las paredes de los poros. Eso a su vez favorece un proceso de difusión del soluto hacia el interior de los poros.

En los análisis utilizando micro-Raman para cada tipo de muestra se obtuvieron imágenes de composición química como ejemplifica la figura 6.a para la muestra 160F. A partir de estas imágenes en cada muestra se seleccionaron dos puntos con el auxilio del arreglo de 400 puntos que se ilustra en la figura 6.b para la muestra 160F. Los dos puntos seleccionados mostraban la mayor diferencia dada por la coloración de la imagen de composición química. En la figura 6.c se muestran los espectros de micro-Raman correspondientes a dos puntos diferentes de la superficie para las muestras tipo F. Desafortunadamente, como se muestra en la figura 6.c, el pico de Raman en 640cm<sup>-1</sup> para la anatasa coincide con un pico presente en el CuO dificultando la identificación de los picos. Además, en la espectroscopía Raman está establecido [?,19] que el ancho medio de los picos crece y los picos se mueven debido al carácter nanocristalino. Por otra parte, se debe tener en cuenta que el espectro de Raman correspondiente a un punto de la superficie no representa la composición por unidad de volumen de la muestra.



Figura 7. Espectros Raman correspondientes a dos puntos diferentes de la superficie de la muestra tipo 160A y 40A.

En el punto 1 de la muestra tipo 40F los picos que se observan corresponden al espectro Raman de la anatasa (ver figura 6.c). En el espectro correspondiente al punto 2 de esta muestra los picos están prácticamente ausentes. Esto puede deberse a la presencia de CuO en ese punto que tiene composición química diferente a la del punto 1. Por otra parte, el desorden cristalino provoca el ensanchamiento de los picos, y puede originar que no se resuelvan picos correspondientes a CuO. Esto puede explicar la línea ascendente que se observa. El espectro correspondiente al punto 2 de la muestra tipo 160F es similar al del punto 2 de la muestra 40F aunque el último refleja un mayor desorden. El espectro del punto 1 perteneciente a la muestra 160F difiere significativamente del espectro de la anatasa. La contribución del CuO se refleja en los picos cercanos en 600cm<sup>-1</sup> y 300cm<sup>-1</sup> (ver 6c).

En los puntos 1 y 2 de las muestra 40A y 160A, en la figura 7, los picos observados se corresponden al espectro Raman de la anatasa (400, 515 y 640cm<sup>-1</sup>). Estos no evidencian la presencia de óxido cúprico visible en los experimentos de absorción óptica. Esto concuerda con el carácter desordenado o amorfo del óxido cúprico obtenido cuando se emplea como precursor una solución acuosa de acetato cúprico.

Para aseverar las características de la distribución del óxido de Cu(II) en el TiO<sub>2</sub> a nivel nanométrico, en estos momentos se encuentran en progreso análisis en profundidad con mayor resolución que los aquí reportados; los cuales serán publicados a posteriori.

#### IV. CONCLUSIONES

Se obtuvieron capas del composito CuO/TiO2 utilizando una técnica sencilla para depositar dentro de los mesoporos de una capa delgada de TiO<sub>2</sub> a partir de soluciones acuosas de acetato de Cu (II) y de formiato de Cu (II) como precursores. Según los experimentos realizados, cuando se utiliza la solución acuosa de acetato de Cu (II), el CuO depositado en el TiO<sub>2</sub> poroso no es cristalino. Por el contrario, cuando se utiliza una solución acuosa de formiato de Cu (II) para la deposición se obtienen nanocristales de CuO, lo que se observa claramente de los patrones de difracción de rayos X. Este resultado también se reafirma con los experimentos de absorción óptica y micro-Raman. El procesamiento de los patrones de DRX indicó que las dimensiones de los nanocristales de TiO<sub>2</sub> y de CuO son similares en los nanocompositos de CuO/TiO2 obtenidos usando el formiato cúprico como precursor. De los resultados obtenidos se infiere que las sales precursora de Cu(II) se adsorben en los poros de TiO2 durante el tiempo de inmersión. A partir de las mediciones de absorción óptica se ratificó que la banda prohibida del CuO es directa, siendo  $E_g = 1.4 \text{eV}$ ; lo que coincide con algunos autores y discrepa de otros.

#### V. AGRADECIMIENTOS

Se reconoce el apoyo del WBI de la Región de Valonia, Bélgica, que ha posibilitado la colaboración entre el instituto Materia Nova, Universidad de Mons y la Universidad de La Habana.

#### REFERENCES

 J. Yu, Y. Hai y M. Jaroniec, J. Colloid Interface Sci. 357, 223 (2011).

- [2] D. Praveen Kumar, M.V. Shankar, M. Mamatha Kumari, G. Sadanandam, B. Srinivas y V. Durgakumari, Chem. Commun. 49, 9443 (2013).
- [3] P. Khemthong, P. Photai y N. Grisdanurak, Int. J. Hydrog. Energy. 38, 15992 (2013).
- [4] J. Deng, L. Wang, Z. Lou y T. Zhang, J. Materials Chem. A 2, 9030 (2014).
- [5] G. S. Pozan, M. Isleyen y S. Gokcen, Applied Catalysis B: Environmental. 140–141, 537 (2013).
- [6] Z. Rui, Y. Huang, Y. Zheng, H. Ji y X. Yu, J. Mol. Catal. A: Chem. 372, 128 (2013).
- [7] X. Zhang y A. Tang, Mater. Express. 2, 239 (2012).
- [8] E. Vigil, B. González, I. Zumeta, C. Domingo, X. Doménech, y J.A. Ayllón, Thin Solid Films. 489, 50 (2005).
- [9] E. Morrison, D. Gutiérrez-Tauste, C. Domingo, E. Vigil y J.A. Ayllón, Thin Solid Films. 517, 5621 (2009).
- [10] F. Marabelli, G.B. Parravicini y F. Salghetti-Drioli, Phys. Rev. B. 52, 1433 (1995).
- [11] K. Nakaoka, J. Ueyama y K. Ogura, J. Electrochem. Soc. 151, C661 (2004).

- [12] D. Barreca , G. Carraro , V. Gombac , A. Gasparotto , C. Maccato , P. Fornasiero y E. Tondello, Adv. Funct. Mater. 21, 2611 (2011).
- [13] Q. Zhang, K. Zhang, D. Xu, G. Yang, H. Huang, F. Nie, C. Liu y S. Yang, Progress in Materials Science. 60, 208 (2014).
- [14] A.S. Zoolfakar, R. A. Rani, A. J. Morfa, A. P.O'Mullaned y K. Kalantar-zadeh, J. Mater. Chem. C 2, 5247 (2014).
- [15] G.P. Smestad y M. Gratzel, J. Chem. Educ. 75, 752 (1998).
- [16] F.P. Koffyberg y F.A. Benko, J. Appl. Phys. 53, 1173 (1982).
- [17] K. Nakaoka, J. Ueyama y K. Ogura, J. Electrochem. Soc. 151, C661 (2004).
- [18] C. Chia-Ying, A. Kosi, F. Nicholas, S. Vibha Rani, D. Sahab, E. Sheryl, Journal of Hydrogen Energy. 36, 15519 (2011). Y. Djaoued, S. Badilescu, P.V. Ashrit, D. Bersani, P.P. Lottici y J. Robichaud, J. Sol-Gel Sci. and Technol. 24, 255 (2002).
- [19] E. Barborini, I.N. Kholmanov, P. Piseri, C. Ducati, C.E. Bottani y P. Milani, Appl. Phys. Lett. 81, 3052 (2002).

## RAY PATHS THROUGH A GRIN LENS: THE CRYSTALLINE CASE PASO DE LA LUZ A TRAVÉS DE UNA LENTE GRIN: EL CASO DEL CRISTALINO

R. C. Cruz-Rodríguez<sup>a</sup>, A. L. Batista-Planas<sup>a</sup>, O. Núñez-Chongo<sup>a</sup>, C. Muñoz-Villaescusa<sup>a</sup> y A. J. Batista-Leyva<sup>a,b†</sup>

a) Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas, Quinta de los Molinos, Av Salvador Allende esq. Luaces. La Habana 10400, Cuba b) Group of Complex Systems and Statistical Physics. Physics Faculty, University of Havana, 10400 Havana, Cuba, abatista@instec.cu<sup>†</sup> † corresponding author

Recibido 10/10/2015; Aceptado 7/11/2015

Rays paths follow a complex trajectory through the human crystalline. This is due to the changes in refractive index with position: crystalline is a GRIN lens. To calculate these trajectories approximate methods are often employed. In this contribution our aim is to compare two numerical methods: the first one based in solving the vector differential equation of the ray paths, while the second one is based on Fermat's principle. For each method different numeric schema are applied, and the results compared based on precision and computing easiness. We found that the most efficient procedure is a Runge-Kuta algorithm with adaptive step for integrating the differential equation derived from Fermat's principle. This procedure will be applied in a ray tracing computer program and also in an optimization algorithm to determine the refraction index distribution inside crystalline.

La luz sigue una trayectoria compleja al atravesar el cristalino. Esto se debe al cambio del índice de refracción con la posición: el cristalino es una lente GRIN. Para calcular dicha trayectoria con frecuencia se emplean métodos aproximados. El objetivo de este artículo es comparar dos métodos: el primero basado en la solución de la ecuación diferencial del rayo y el segundo basado en el principio de Fermat. En cada caso se emplean dos esquemas numéricos para resolver la ecuación diferencial correspondiente. Los resultados son comparados teniendo en cuenta la exactitud y el costo computacional. Se determinó que el método más eficiente es el basado en la resolución de la ecuación derivada del principio de Fermat mediante un esquema de Runge-Kutta de paso adaptativo. Este método será usado en un programa informático de trazado de rayos que se encuentra en desarrollo y como parte de un algoritmo de optimización para determinar los parámetros que caracterizan la distribución de índice de refracción en cristalinos.

PACS: Geometrical optics 42.15.-i, Gradient index (GRIN) devices 42.79.Ry, Ophthalmic optics 42.66.Ct, Eye 42.66.-p, Numerical methods (mathematics) 02.60.-x

#### I. INTRODUCTION

The mechanism of vision in humans is a rather complex process that includes the coordinated work of cornea, crystalline and controlling muscles, in order to form an in focus image on the retina (see fig. 1).



Figure 1. Schematic of human eye: anterior and posterior corneal surfaces (1, 2), iris (3), anterior and posterior crystalline surfaces (4, 6), plane containing crystalline nucleus (5), retina (7).

Particularly the crystalline plays a key role, firstly through accommodation, i. e. the variation of its focal length due to

changes in thickness and curvature of its surfaces [1]. But also the peculiar density distribution of proteins both in radial and axial directions creates a gradient of the refraction index: crystalline is a GRIN lens [2, 3]. This fact makes difficult the exact calculation of ray paths through crystalline.

An additional problem is related with difficulties in the determination of the distribution of the refraction index. Firstly, because the study of in vivo refraction index distribution is only attainable using MRI [4]. Secondly, because GRIN's parameters change with age [5]. This provokes that frequently the GRIN distribution is substituted in calculations by an average refraction index [6,7] with the correspondingly lost in accuracy. So, a method for determining the distribution function is of paramount importance. There is an indirect method of measuring this distribution in vitro. Let us suppose that we measure the incoming and outgoing directions of a light ray in an isolated crystalline. Then, using an optimization algorithm, we could find the distribution of refraction index that better reproduces the experimental details. Clearly, for doing this we need a method to calculate the trajectory knowing the index distribution. Though there are methods to make the analytical tracing of light rays in the paraxial region [8], approximate methods are more often employed.

A widely used approach to calculate ray paths through human lens (due to its simplicity) is to consider a shell model [2,3,9]. The continuous index distribution is substituted by a discrete increment of the refraction index from the surface to the core, dividing the crystalline in shells, each one having a constant value of refraction index, equal to that of its outer surface. This model reproduces well the overall behavior of human lens [9] when there is no need of great accuracy. Another approach, computationally more expensive, but also more exact, is to solve a differential equation describing the ray trajectories. Here we consider different numeric schema for a widely applied GRIN model named bi parabolic model [10] used by some of us in a previous work [11].

We solved the model by two different methods: firstly using the eikonal equation and secondly with the aid of Fermat's principle. In both cases the resulting differential equation is solved numerically, and all results are compared. The main objective of the present contribution is to evaluate which of the different numerical approaches is more suited for determining the ray path through the crystalline given an index distribution function. The selected method will be applied in solving two important problems: the determination of the index distribution in a crystalline from experimental data, and its use in a computational ray tracing model of human eye to be applied in ophthalmologic practice.

#### II. THEORY

#### II.1. GRIN MODELS

Crystalline is a GRIN lens that varies its refraction index both in axial and transversal directions. Most authors agree in considering a monotonic increment of refraction index from the surface to the nucleus [13]. This increment has been modeled in different ways, among which the more used are:

• A bi parabolic model [10], It considers the dependence of the refraction index with position as:

$$n(z,w) = n_{00} + n_{01}z + n_{02}z^2 + n_{12}w \tag{1}$$

where *z* is the coordinate along the symmetry axis of the lens and  $w^2 = x^2 + y^2$  is perpendicular to it.  $n_{ij}$  are parameters of the model, adjusted from experimental data. Due to the fact that crystalline refraction index has a maximum at its nucleus, and a minimum at the outer surface, the model can be implemented in the following way:

$$n(z,w) = \begin{cases} n_n + n_{a1}(z-d)^2 + n_0 w^2 \\ n_n + n_{p1}(z-d)^2 + n_0 w^2 \end{cases}$$
(1.1)

Here d is the z coordinate of the nucleus, which is contained in plane (5), fig. 1. The model depends on 5 parameters.

• The 3-parameter model:

 $n(\rho,\theta) = n_n + (n_n - n_s) \left[\frac{\rho}{\rho_s(\theta)}\right]^p$ (2)

where  $(\rho, \theta)$  are the polar coordinates of a point inside crystalline, the sub index n refers to the nucleus and s to the surface of the crystalline,  $\rho_s(\theta)$  is the distance from the nucleus to the surface in  $\theta$  direction. p is the GRIN coefficient that has been reported to vary with age and is around 3 [12].

For computational easiness we will use here the first one. We plan to use the other one in a future work.

#### II.2. SOLVING THE GRIN LENS

To calculate the ray paths through crystalline (independently of the GRIN model used) we apply two strategies: in the first one we use the vector differential equation of the ray paths, derived from the eikonal equation [14]:

$$\frac{d}{ds}\left[n(s)\frac{d\vec{r}}{ds}\right] = \nabla n(s) \tag{3}$$

In eq. 3 is the position vector of a point in the ray path, s is the length of the ray from an appropriate origin, and n(s) gives the variation of refraction index along the trajectory. Expanding the square brackets and introducing the tangent vector eq. 3 transforms into the following system of differential equations:

$$\frac{d\vec{r}}{ds} = \vec{t}(s) \tag{4a}$$

$$\frac{d\vec{t}}{ds} = \frac{1}{n(s)} \left[ \nabla n(s) - \frac{dn}{ds} \vec{t} \right]$$
(4b)

Introducing the dependences with (z, w) and a new variable  $\tau$ , defined as  $d\tau = ds/n(s)$ , we finally find:

$$\frac{dz}{d\tau} = t_z(\tau) \tag{5a}$$

$$\frac{dw}{d\tau} = t_w(\tau) \tag{5b}$$

$$\frac{dt_z}{d\tau} = n(z, w) \frac{\partial n}{\partial z}$$
(5c)

$$\frac{dt_w}{d\tau} = n(z,w)\frac{\partial n}{\partial w}$$
(5d)

Equations 5a-5d can be solved with an appropriate numerical method if the functional dependence of the GRIN model is known. For this, proper initial condition has to be imposed.

The second method is based on Fermat's principle, which states (in its strongest formulation [15]) that the optical length of a real ray between any two points is shorter than the optical length by any other curve which joins the two points and lies in a certain regular neighborhood of it. The optical path is defined as:

$$\Delta l = \int_{a}^{b} n(s) ds \tag{6}$$

It is easy to verify that the principle also states that the time the light travels by the actual trajectory is smaller than the time by any other possible trajectory. Writing n(s) and the differential path ds in a reference frame, for instance (z, w), we obtain:

$$\Delta l = \int_{a}^{b} n(z, w) \sqrt{1 + [w'(z)]^2} dz = \int_{a}^{b} L(z, w) dz$$
(7)

This variational principle takes us to the Lagrange–Euler differential equation:

$$\frac{\partial L}{\partial w} - \frac{d}{dz} \frac{\partial L}{\partial w'} = 0 \tag{8}$$

Operating eq. 8 it yields [11]:

$$w''(z) = f_1 \left\{ 1 + [w'(z)]^2 \right\} - f_2 \left\{ w'(z) + [w'(z)]^3 \right\}$$
(9)

where,

$$f_1 = \frac{1}{n(z,w)} \frac{\partial n(z,w)}{\partial w}; \ f_2 = \frac{1}{n(z,w)} \frac{\partial n(z,w)}{\partial z}$$
(1)

For the particular case of eq. 1 we obtain:

$$f_1 = \frac{2n_{12}w}{n(z,w)}; \ f_2 = \frac{n_{01} + 2n_{02}z}{n(z,w)}$$
(11)

Equation (9) can be reduced to a first order differential equation defining m(z) = w'(z), to obtain:

$$\frac{dw}{dz} = m(z) \tag{12a}$$

$$\frac{dm}{dz} = \frac{1}{n(z,w)} \left[ 1 + m^2(z) \right] \left[ \frac{\partial n}{\partial w} - \frac{\partial n}{\partial z} m(z) \right]$$
(12b)

Equations 12a-12b can be solved numerically.

#### III. NUMERICAL PROCEDURES

Numerical integration of the equations 5a-5d and 12a-12b was performed using a fifth-order embedded Runge–Kutta (RK45), found in reference [16] which is based on a paper by Dormand and Prince [17]. Dormand–Prince method is an adaptive step size control method to solve the general problem of the form:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \tag{13a}$$

$$y(x_0) = y_0 \tag{13b}$$

in the discrete set of points  $(x_i, y_i)$ .

The adaptive step size control means that to approximate the solution  $x_f$ ,  $y_f$  the equation 13a is integrated advancing from  $x_0$  to  $x_f$  with a variable step size  $h_i = x_i - x_i(i - 1)$  and  $h_i$  are selected maintaining a prescribed error tolerance for the numerical solution  $y_f$  with the minimum computational effort. This feature is strongly desired when evaluating the function  $f(x_i, y_i)$  (in our case depends on n(z, w) model) is computational expensive.

The equations where also solved using classical Runge-Kutta 4 (RK4) method (Sharma formula for equations 5a-5d).

Equations 5a-5d and 12a-12b need to be completed with the initial conditions in order to write them in the form of 13a-13b and solve numerically.

For 5a-5d the initial conditions can be written as:

$$z(0) = z_0 \tag{14a}$$

$$w(0) = w_0 \tag{14b}$$

$$t_z(0) = n(z_0, w_0)t_{z0} \tag{14c}$$

$$t_w(0) = n(z_0, w_0)t_{z0} \tag{14d}$$

where  $[t_{z0}, t_{w0}]$  is a unitary vector related to  $m_0$  (the direction of the ray on the initial point  $(z_0, w_0)$  by the equations:

$$t_{z0} = \frac{1}{\sqrt{1 + m_0^2}}$$
(15a)

$$t_{w0} = \frac{m_0}{\sqrt{1 + m_0^2}}$$
(15a)

For 12a-12b we have:

0)

$$w(z_0) = w_0 \tag{16a}$$

$$w'(z_0) = m_0 \tag{16b}$$

The outgoing point at the posterior crystalline surface was calculated using Hermit interpolation between last point inside the crystalline and first point outside, so it was needed to test if the ray path was inside the crystalline in each iteration step.

Due to the fact that the GRIN model does not have analytical solutions, we established a numerical standard to compare with. This was calculated using a computationally expensive Runge Kutta 8, with adaptive step (RK853) [18] with high precision arithmetic (float128 type as defined in the Boost library of C++, which guaranties 34 exact decimal digits). This method is too slow for being used in real applications, but is exact enough for using it as comparison standard. The combination RK853 – float128 allows to obtain more than 16 exact significant digits, which can be considered exact if you compare with a type double data in C++. All programs were implemented in this language.

#### IV. RESULTS AND DISCUSSION

In what follows, we will solve the equations derived from the eikonal equation and from Fermat's principle with the two numerical methods explained above. Their results will be labeled as E-RK4, E-RK45 and F-RK4, F-RK45 respectively. The comparison parameter, the absolute error ( $\epsilon$ ), is the modulus of the difference between the value obtained with a given method and the one obtained with RK853.

As comparison parameters were selected:

 the number of evaluations necessary to get a given absolute error in the position of the exit ray.

- the number of evaluations necessary to get a given absolute error in the slope of the exit ray.
- the processing time necessary to get a given absolute error in the position and slope of the exit ray for a given computer configuration.

Table 1. Parameters of the GRIN model

d [mm]	n <sub>N</sub>	$n_{a1}$	$n_{p1}$	$n_0$
1.59	1.407	-0.015427	-0.006605	-0.001978

Table 1 shows the parameters of the model, used in eq. (1').

We describe the crystalline as the locus between two aspheric surfaces (anterior and posterior) with equations:

$$w^2 + (Q+1)z^2 - 2zR = 0 \tag{17}$$

In eq. 17 Q is the asfericity parameter, and R is the surface radius at the center of symmetry. The geometrical data describing crystalline surfaces were taken from ref. [11] and are shown in Table 2.

Table 2. Geometric parameters of the crystalline.

Surf	Asf (Q)	Radius R [mm]	Pos z [mm]
Ant	-0.94	12.4	0.00
Post	0.96	-8.1	4.02

Figure 2 displays the number of evaluations needed in each method in order to achieve a given absolute error in the position of the exit ray. As position we mean the w coordinate, because once we know this value, z coordinate is univocally determined from the equation of the posterior crystalline surface.



Figure 2. Number of evaluations needed in order to achieve a given error for each method: Position of the exit ray.

From fig. 2 it is easy to see that RK adaptive performs better if a high accuracy in the position is needed. This is true both for the eikonal and Fermat's equations.

Regarding the precision in calculating the exit slope, fig. 3 shows results that are consistent with those of fig.2.

Summarizing, when using the numeric schema RK4 the number of evaluations increases very fast when a high precision is needed, though for errors above  $10^{-7}$  the number of evaluations is smaller than the required for RK45. This is easy to understand: when the allowed tolerance is big, the six evaluations per step needed in RK45 surpass the four needed in RK4. But when the tolerance is small, the adaptive step compensates this difference, diminishing the number of iterations needed for RK45.

From figs. 2 and 3 it is evident that numeric procedure RK45 is more convenient for calculating the trajectories when high precision is needed. Regarding the selection of the most appropriate differential equation, though the number of evaluations for solving the equation derived from Fermat's principle is always smaller than in the case of using the eikonal equation, the difference is not remarkable. So, for having a better selection criterion, we use another comparison quantity: execution time.

For this, we worked in a computer with the following architecture, which can be easily present in an average ophthalmological service in Cuba: Intel(R) Celeron(R) CPU E3400 at 2.60 GHz and 2 GB of RAM.



Figure 3. Number of evaluations needed in order to achieve a given error for each method: Slope of the exit ray.

Figure 4 shows the execution time, calculated as the average of 50 different tracks through crystalline for a given error: fig. 4a shows the execution time to achieve a given accuracy in the position of the exit ray and fig. 4b in the slope of the exit ray.

It is important to understand that these are the most important parameters, because together they determine the position at which the light ray intercepts the retina, and so the visual sensation.

Figure 4 gives answer to the raised question: the execution time is smaller in the Fermat formulation. Though the difference seems to be too small to matters, if the model were used to reconstruct the image of an object, thousands of rays should be traced, and the difference becomes appreciable.



Figure 4. Execution time for achieving a given accuracy in the determination of the exit point (a) and the slope of the exit ray (b).

#### V. CONCLUSIONS

We have performed a group of numerical experiments in order to choose the best computer model for the determination of ray paths through a human crystalline. The main result is that a Runge Kuta integration algorithm with adaptive step applied to the differential equation derived from the application of Fermat's principle to the GRIN model of the human lens is the most efficient, and will be applied in the model eye under development by our research group. This will also be a part of an optimization algorithm for determining the GRIN parameters of the crystalline based on *in vitro* experiments.

This model will also help in the understanding of the influence of the lens in the aberrations of human eyes. In a future work we will apply this study to different models of GRIN, with polynomial higher order.

#### REFERENCES

- [1] A. L. Sheppard et al, Invest. Ophthalmol. Vis. Sci. 52, 3689 (2011).
- [2] M. A. Rama et al, Optics Communication 249, 595 (2005).
- [3] M. V. Pérez et al, J. Opt. A: Pure App. Opt. 5, S293 (2003).
- [4] C. E. Jones, D. A. Atchison and J. M. Pope, Optom. Vis. Sci. 84, 990 (2007).
- [5] Y-L. Chen, L. Shi, J. W. L. Lewis and M. Wang, Opt. Express 20, 12498 (2012).
- [6] C. de Freitas et al, Opt. Lett. 38, 85 (2008).
- [7] W. N. Charmann and D. A. Atchison, Biomed. Opt. Express 5, 31 (2013).
- [8] M. Bahrami and A. V. Gonchrov, J. Biomed. Opt. 17(5), 055001 (2012).
- [9] Y. J. Liu et al, Optik 116, 241 (2005).
- [10] H.-L. Liu and N. A. Brennan, J. Opt. Soc. Am. A 14(8), 1695 (1997).
- [11] C. Muñoz-Villaescusa, O. Núñez-Chongo and A. J. Batista-Leyva, Rev. Cub. Fis. 31, 35 (2014).
- [12] A. de Castro et al, J. Mod. Opt. 58, 1781 (2011).
- [13] R. Navarro, J. Optom. 2(1), 3 (2009).
- [14] M. Born and E. Wolf, Principles of Optics, 6th Ed. (Pergamon Press, New York, Oxford, 1986), pp 122 – 124.
- [15] M. Born and E. Wolf, ibid, p 128.
- [16] W. H. Press et al, Numerical Recipes on C. The Art of Scientific Computing, 2nd Ed. (Cambridge University Press, Cambridge, 1997), pp 731 – 777.
- [17] J. R. Dormand and P. J. Prince. J. Comput. App. Math. 6, 19 (1980).
- [18] J. R. Dormand and P. J. Prince. Runge-Kutta Triples. Computers and Mathematics with Applications, 12A, 1007 (1986).

## EFECTO UNRUH EN UN CAMPO ESTOCÁSTICO DE VACÍO ON THE UNRUH EFFECT OF A STOCHASTIC FIELD OF VACUUM

A. González-Lezcano<sup>a</sup> y A. Cabo-Montes de Oca<sup>b†</sup>

a) Departamento de Física, Universidad de Pinar del Río

b) Instituto Cibernética, Matemáticas y Física, La Habana. cabo@icimaf.cu<sup>+</sup>

+ corresponding author

Recibido 10/10/2015; Aceptado 10/11/2015

Se deduce la ocurrencia del efecto Unruh o Radiación de Hawking considerando al espacio ocupado por un campo estocástico de vacío clásico. Las propiedades de simetría de este campo permiten deducir la forma funcional adecuada del espectro para llegar a un resultado en completo acuerdo con la Teoría Cuántica de campos. La ruptura de esta simetría, ya sea por la presencia de un campo gravitatorio muy fuerte o por el movimiento uniformemente acelerado en una dirección prefijada, es la causa del cambio total de las propiedades del vacío y de la manera como es percibido.

PACS: 05.40.-a, 11.30.Er

#### I. INTRODUCCIÓN

Stephen Hawking [1,2] predijo que un agujero negro debería emitir radiación caracterizada por una temperatura:

$$T_h = \frac{\hbar g}{2\pi k_B c'},\tag{1}$$

donde  $\hbar$  y *c* son respectivamente la constante de Planck y la velocidad de la luz en el vacío, además, *g* es la intensidad del campo gravitatorio en la superficie del agujero negro, y  $k_B$  es la constante de Boltzmann. Esto resultaba de la acción del fuerte campo gravitatorio sobre el campo de vacío (cuántico). De manera separada fue demostrado por Davies y Unruh [3] que un detector uniformemente acelerado, con aceleración *a*, en el vacío responde como si estuviera en un baño térmico con temperatura:

$$T_u = \frac{\hbar a}{2\pi k_B c}.$$
(2)

Ambas situaciones son equivalentes, puesto que el campo gravitatorio puede considerarse equivalente a un sistema no inercial de referencia donde a = g. El resultado consiste en que el observador percibe, ya sea cerca del agujero negro o en el sistema no inercial uniformemente acelerado, una radiación caracterizada por una distribución de Bose-Einstein con temperatura dada por las expresiones (1) y (2) respectivamente. Este intrigante resultado de la Teoría Cuántica del Campos ha sido derivado de una manera sencilla en [1] como una consecuencia del cambio no homogéneo temporalmente que ocurre en las fases de los modos que componen el espectro del campo no masivo. Se realizará un estudio similar, pero basado en un campo puramente clásico y con espectro de igual forma que el de un campo no masivo, basándose solamente en las A deduction of the occurrence of the Unruh effect and the Hawking radiation is given, assuming that the space is completely filled by a stochastic classic field. The symmetry proprieties of this field allows a deduction of the proper functional form of the spectrum in order to obtain a result in complete agreement with Quantum Field Theory. The symmetry breaking, either by the presence of a strong gravitational field or by the uniformly accelerated movement in a preferential direction, is the cause of the radical change in the proprieties of vacuum and the way it is perceived.

propiedades puramente estocásticas del campo. Además se trabajará solamente con el sistema no inercial de referencia, es decir, con el efecto Unruh, pues el resultado de la Radiación de Hawking se desprende directamente de este.

La Electrodinámica Estocástica (SED, por sus siglas en inglés) ha logrado, desde bases fundamentealmente clásicas, la recuperación de muchos de los resultados de la Mecánica Cuántica [3, 4, 7, 11]. El postulado fundamental de la SED consiste en suponer que el espacio está ocupado en su totalidad por un campo electromagnético de vacío [12, 13], es decir, que está presente aún en ausencia de fuentes [7,14]. Este campo de vacío debe ser extremadamente simétrico y a partir de sus propiedades de invarianza de Lorentz [7, 10] se ha establecido su forma espectral como de tipo  $\propto \omega^{1/2}$  (siendo  $\omega$  la frecuancia de un modo del espectro). Una de las posibles vías para lograr romper la simetría del campo estocástico de vacío consiste en pasar a un sistema no inercial de referencia acelerado uniformemente. Esta ruptura se garantiza por la aparición de una dirección preferencial. La obtención del efecto Unruh en este caso ya es un resultado bien establecido en la SED [3], pero el acercamiento ofrecido aquí permite centrar la atención en las propiedades puramente estocásticas del campo y no estar atado a especificidades del tipo de interacción que este representa. La forma funcional del espectro puede ser hallada también solo basándose en propiedades del campo como proceso estocástico analizado en el sistema de referencia propio de una partícula sometida a la acción de este.

#### II. INVARIANZA DE ESCALA Y ESPECTRO DEL CAMPO ESTOCÁSTICO DE VACIÓ

En esta sección se emplean los resultados expuestos en [5,6] para obtener la forma de la densidad espectral del campo analizado desde el sistema propio de una única partícula en interacción con este. Así es posible considerar al campo como proceso estocástico puesto que la partícula en su sistema propio siempre está en el origen de coordenadas. Teniendo en cuenta que el proceso que caracterice la interacción del campo de vacío sobre una partícula debe ser invariante relativista deben cumplirse las dos condiciones siguientes: 1) Todas las frecuencias tienen que estar representadas en el espectro durante un tiempo de muestreo T suficientemente largo  $(T \rightarrow \infty)$ , de lo contrario sería posible distinguir entre sistemas inerciales de referencia apreciando los cambios en las frecuencias del espectro producto al corrimiento Doppler. 2) Todas las frecuencias deben estar igualmente representadas, es decir, su amplitud de Fourier debe coincidir (Para  $T \rightarrow \infty$ ). Bajo estas condiciones debe verificarse que ante una transformación de escala ( $\omega \rightarrow \Lambda^{-1}\omega$ ) [5, 6], el espectro conserve sus propiedades, es decir:

$$\tilde{f}\left(\frac{\omega}{\Lambda}\right) = \tilde{f}(\omega),$$
(3)

siendo  $\tilde{f}(\omega)$  la transformanda de Fourier del campo según se definió en [5, 6]. Con este criterio, que se basa solamente en las propiedades estocásticas del campo, se garantiza el cumplimiento de las condiciones impuestas y permite afirmar, según los resultados de [5, 6], que la distribución espectral  $S_f(\omega)$  es proporcional a la frecuencia:

$$S_f(\omega) \propto \omega.$$
 (4)

Las propiedades antes encontradas, preparan las condiciones para poder proponer, en lo que sigue, una forma funcional del campo estocástico [7–9]. Para esto se pasa al sistema propio. Si se toma un intervalo temporal largo, pero finito [0, T], el campo puede ser expresado como una serie de Fourier [7]:

$$f_{A,B}(0, \tau) = \sum_{n=1}^{\infty} \left( A_n \cos \omega_n \tau + B_n \sin \omega_n \tau \right).$$
 (5)

Los coeficientes  $A_n$  y  $B_n$  son variables aleatorias normalmente distribuidas alrededor del valor cero, con una desviación estándar  $\left[S_f(\omega_n)\Delta\omega\right]^{1/2}$  [10] (siendo  $\Delta\omega = 1/T$ ), una descripción alternativa implica fases aleatorias de cada modo distribuidas uniformemente [7]. La fórmula anterior se ha expresado en términos de una fase aleatoria [10] en la forma:

$$f_{\theta}(0, \tau) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos(\omega_n \tau + \theta_n), \qquad (6)$$

donde:

$$a_n = \left[2S_f(\omega_n)\,\Delta\omega\right]^{1/2} \propto \left[2\omega_n\Delta\omega\right]^{1/2},\tag{7}$$

y  $\theta_n$  es la fase aleatoria uniformemente distribuida en el intervalo  $[0, 2\pi]$ . Para poder demostrar la validez de esta expresión en el sistema de laboratorio, se procede de la siguiente manera: Supongamos que en el sistema de laboratorio se puede expresar el campo estocástico de vacío como una superposición de modos tipo ondas planas con fase aleatoria.

$$f_{\theta}(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \omega_n^{\alpha} \cos\left(\omega_n \left(t + \frac{x}{c_0}\right) + \theta_n\right),\tag{8}$$

donde  $k_n = \omega_n/c$  es una relación de dispersión análoga a la del campo electromagnético. Se planteará entonces el problema de encontrar el valor del parámetro  $\alpha$  para que en el sistema propio se preserve la invariancia de escala propuesta. Para esto, se escribe la transformada de Fourier de la fuerza en el sistema de reposo como función de la fuerza en el sistema de laboratorio según la correspondiente ley de transformación [10]:

$$\tilde{f}(\Omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi T}} \int_{-T}^{T} d\tau \sqrt{1 - \beta(\tau)^2} \times \sum_{\omega} \omega^{\alpha} \cos\left(\omega \left(t(\tau) - \frac{x(\tau)}{c}\right) + \theta_{\omega}\right) \exp\left(-i\Omega\tau\right),$$
(9)

$$\tilde{f}(\Omega) =$$

$$= \int_{-T}^{T} d\tau \sqrt{1 - \beta(\tau)^{2}} \sqrt{T} \times$$

$$\times \sum_{\omega} \Delta \omega \omega^{\alpha} \cos\left(\omega \left(t(\tau) - \frac{x(\tau)}{c}\right) + \theta_{\omega}\right) \exp\left(-i\Omega\tau\right).$$
(10)

Ahora se efectúa un cambio de variables definido como una transformación de escala según el parámetro  $\Lambda$  aplicada a toda la trayectoria de la partícula para todo instante de tiempo. Esta transformación tiene la propiedad de efectuar el mismo escalamiento en el tiempo propio de la trayectoria. Explícitamente se tiene que:

$$\begin{aligned} t'(\tau') &= \Lambda t(\tau), & x'(\tau') = \Lambda x(\tau), \\ \tau' &= \Lambda \tau, & \omega = \Lambda \omega' \\ \beta(\tau) &= \beta'(\tau') = \frac{1}{c} \frac{dx}{dt} = \frac{1}{c} \frac{d\Lambda x}{d\Lambda t} = \frac{1}{c} \frac{dx'}{dt'}, \end{aligned}$$
(11)

$$\tau(t) = \int_{0}^{t} \frac{dt^{*}}{\sqrt{1 - \beta(\tau(t^{*}))^{2}}},$$
  
$$t(\tau) = \int_{0}^{\tau} \sqrt{1 - \beta(\tau^{*})^{2}} d\tau^{*},$$
 (12)

de manera que al sustituir en la expresión (10) se obtiene:

$$\tilde{f}(\Omega) = \Lambda^{\alpha - \frac{1}{2}} \tilde{f}\left(\frac{\Omega}{\Lambda}\right).$$
(13)

En (13) se impone que se cumpla la condición (3) entonces se llega a que  $\alpha = \frac{1}{2}$ . Esto quiere decir que en el sistema de laboratorio se puede considerar una superposición de modos tipo ondas planas con la forma:

$$f_{\theta}(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(\omega_n) \cos(\omega_n t + k_n x + \theta_n), \qquad (14)$$

donde  $a_n(\omega_n) \propto \omega_n^{1/2}$ . La relación (13), a pesar de que permite encontrar la dependencia de la amplitud de cada modo

 $\infty$
con respecto a la frecuencia, parece imponer restricciones sobre la independencia estadística de las fases aleatorias. Las posibles implicaciones de estas restricciones no se han investigado a profundidad y es por eso que la argumentación de la posibilidad de deducir la equivalencia entre el campo definido en el sistema propio con el campo escalar no masivo no se considera del todo completa.

#### III. SISTEMA DE RINDLER

Una aceleración se dirá uniforme si tiene siempre el mismo valor *a* medido en un sistema de referencia instantáneo en el que el observador está en reposo. Al sistema de referencia con tales propiedades se le conoce como sistema de Rindler. Si se denota el tiempo medido en el sistema de Rindler como  $\tau_R$  y se tiene en cuenta que la relación entre la aceleración *a* medida en el sistema de laboratorio  $\frac{dv_R}{dt}$  viene dada por la transformación de Lorentz, queda:

$$\frac{dv_R}{dt} = a \left(1 - \beta_R^2\right)^{\frac{3}{2}},\tag{15}$$

en donde  $\beta_R = \frac{v_R}{c}$ . Integrando y tomando  $v_R = 0$  en t = 0 se tiene que:

$$v_R(t) = \frac{at}{\sqrt{1 + \frac{a^2 t^2}{c^2}}}.$$
(16)

Los diferenciales del tiempo de Rindler  $\tau_R$  y del tiempo en el sistema de laboratorio estarán relacionados de manera que:

$$dt = \frac{d\tau_R}{\sqrt{1 - \beta_R^2}}.$$
(17)

Sustituyendo (15) en (17) e integrando, además teniendo en cuenta que t (0) = 0 se obtiene la relación:

$$t(\tau_R) = \frac{c}{a} \sinh\left(\frac{a\tau_R}{c}\right),\tag{18}$$

Lo que conduce a las relaciones:

$$v\left(\tau_R\right) = c \tanh\left(\frac{a\tau_R}{c}\right),\tag{19}$$

$$x(\tau_R) = \frac{c^2}{a} \cosh\left(\frac{a\tau_R}{c}\right).$$
 (20)

Las coordenadas hiperbólicas  $t(\tau_R)$  y  $x(\tau_R)$  son conocidas como coordenadas de Rindler. Para establecer adecuadamente la analogía entre el potencial del campo estocástico de vacío y el campo escalar cuántico, se exponen a continuación los cálculos realizados para la distribución espectral de un campo cuántico considerado, por simplicidad, solamente en un punto específico del espacio, este toma la forma:

$$\hat{\phi} = \sum_{k} \left( \frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k V} \right)^{\frac{1}{2}} \left[ \hat{a}_k e^{-i\omega_k t} + \hat{a}_k^{\dagger} e^{i\omega_k t} \right], \tag{21}$$

donde  $k = \pm \frac{\omega_k}{c}$  y  $\hat{a}_k$  y  $\hat{a}_k^{\dagger}$  son respectivamente los operadores de aniquilación y creación para el k-ésimo modo. Además se verifica que:

$$\left[\hat{a}_{k},\,\hat{a}_{k'}^{\dagger}\right] = \delta_{kk'} \ \left[\hat{a}_{k},\,\hat{a}_{k'}\right] = 0, \tag{22}$$

donde las ecuaciones (22) representan las relaciones de cuantificación. Suponiendo que se está en un estado térmico a temperatura  $T_f$ , de manera que el valor de espectación del operador asociado al número de ocupación  $\hat{a}_{\mu}^{\dagger}\hat{a}_{k}$  será:

$$\langle \hat{a}_k^{\dagger} \hat{a}_k \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_k}{k_B T_f}} - 1},\tag{23}$$

el término  $1/\left(e^{\frac{\hbar\Omega}{k_BT_f}}-1\right)$ es el correspondiente a la distribución de Bose-Einstein. A continuación se considera el operador transformado de Fourier del campo, es decir:

$$\hat{\varphi}(\Omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{\phi} e^{i\Omega t} = \sum_{k} \left(\frac{2\pi\hbar c^{2}}{\omega_{k}V}\right)^{\frac{1}{2}} \hat{a}_{k} \delta\left(\omega_{k} - \Omega\right), \quad \Omega > 0.$$
(24)

De manera que:

$$\langle \hat{\varphi}^{\dagger}(\Omega) \, \hat{\varphi}\left(\Omega'\right) \rangle = \sum_{k} \left(\frac{2\pi\hbar c^{2}}{\omega_{k}V}\right) \langle \hat{a}_{k}^{\dagger} \hat{a}_{k} \rangle \delta\left(\Omega - \Omega'\right) \delta\left(\omega_{k} - \Omega\right).$$
(25)

Si se toma el límite cuando el volumen tiende a infinito y la suma por *k* se transforma en una integral  $\sum_k \rightarrow \frac{V}{2\pi} \int dk$ , teniendo en cuenta (23) se obtiene que:

$$\langle \hat{\varphi}^{\dagger}(\Omega) \, \hat{\varphi}\left(\Omega'\right) \rangle = \frac{\frac{2\pi\hbar c}{\Omega}}{e^{\frac{\hbar\Omega}{k_B T_f}} - 1} \delta\left(\Omega - \Omega'\right). \tag{26}$$

Esta magnitud se calcula simplemente para poder mostrar luego que un cálculo similar realizado sobre el campo estocástico de vacío en analogía con  $\hat{\phi}$ , visto desde el sistema de Rindler permite obtener resultados igualmente caracterizados por un término tipo distribución de Bose-Einstein de la misma forma que (26). En el trabajo de Milonni [1] se limitan al estudio del mismo campo pero en lugar de estar en un estado térmico, se supone que

$$\langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{k'} \rangle = \delta_{kk'}. \tag{27}$$

En el caso del potencial del campo escalar de vacío, la relación (27) se sustituye por una análoga donde el promedio se toma por todas las realizaciones del ensemble.

#### IV. CAMPO ESTOCÁSTICO, SISTEMA DE RINDLER Y Sustituyendo (34) en (33) se tiene que: EFECTO UNRUH

Si se considera que sobre una partícula en movimiento actúa el campo estocástico de vacío y se usa una fuerza de tipo:

$$f_{\theta}(x, t) = -\nabla_{x} \Phi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_{n}(\omega_{n}) \cos(\omega_{n}t + k_{n}x + \theta_{n}), \quad (28)$$

de manera que los coeficientes garanticen un espectro similar al de la SED [3,7]:  $a_n(\omega_n) \propto \omega_n^{1/2}$ . Entonces el potencial  $\Phi(x, t)$ es:

$$\Phi(x, t) = -\sum_{n=1}^{\infty} \frac{a_n(\omega_n)}{\omega_n} \sin(\omega_n t + k_n x + \theta_n).$$
(29)

Al hacer los cambios correspondientes en la fase se aprovecha que esta es aleatoria (cambiar la fase en  $\frac{3\pi}{2}$  no afecta la uniformidad de su distribución), entonces se puede reescribir el potencial en la siguiente manera:

$$\Phi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{a_n(\omega_n)}{\omega_n} \cos(\omega_n t + k_n x + \theta_n).$$
(30)

Teniendo en cuenta la forma de los coeficientes  $a_n$ , entonces queda que el nuevo coeficiente dependerá de la frecuencia de la forma  $\propto \omega_n^{-1/2}$ , que es análoga a la dependencia propuesta en [1] para un campo cuantizado no masivo. De manera que si se pasa al sistema de Rindler, y se aplica el mismo procedimiento que en la referencia [1], se tiene que:

$$\Phi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n e^{i(\omega_n t + k_n x + \theta_n)} + \sum_{n=1}^{\infty} b_n^{\star} e^{-i(\omega_n t + k_n x + \theta_n)}, \qquad (31)$$

donde se omite la dependencia explícita con  $\omega_n$  por simplicidad y se ha expresado el potencial real en términos de exponenciales complejas y los coeficientes son de la forma  $b_n \propto \omega_n^{-1/2}$ . El tiempo y la posición medidos en el sistema de laboratorio en función del tiempo de Rindler  $\tau_R$ , serán:

$$t(\tau_R) = \frac{c}{a} \sinh\left(\frac{a\tau_R}{c}\right), \ x(\tau_R) = \frac{c^2}{a} \cosh\left(\frac{a\tau_R}{c}\right)$$
(32)

Para mayor comodidad se denota:  $c_n(\omega_n) = b_n(\omega_n)e^{i\theta_n}$  quedando:

$$\Phi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[ c_n e^{i(\omega_n t + k_n x)} + c_n^{\star} e^{-i(\omega_n t + k_n x)} \right].$$
(33)

Teniendo en cuenta las transformaciones (32), se llega a que:

$$[\omega_n t(\tau_R) + k_n x(\tau_R)] = \frac{\omega_n c}{a} \exp\left(\frac{a\tau_R}{c}\right).$$
(34)

$$\Phi(\tau_R) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{i \left[\frac{\omega_n c}{a} \exp\left(\frac{a\tau_R}{c}\right)\right]} + \sum_{n=1}^{\infty} c_n^{\star} e^{-i \left[\frac{\omega_n c}{a} \exp\left(\frac{a\tau_R}{c}\right)\right]}.$$
(35)

La transformada de Fourier de la expresión (35) es:

$$\tilde{\Phi}(\Omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_R e^{i\Omega\tau_R} \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{i\left[\frac{\omega_n c}{a} \exp\left(\frac{a\tau_R}{c}\right)\right]} + \sum_{n=1}^{\infty} c_n^{\star} e^{-i\left[\frac{\omega_n c}{a} \exp\left(\frac{a\tau_R}{c}\right)\right]}.$$
(36)

Tomando el valor medio según el ensemble del producto  $\tilde{\Phi}(\Omega) \tilde{\Phi}(\Omega')$  y teniendo en cuenta la ortogonalidad de los exponenciales complejos:

$$\langle c_n(\omega_n) c_m(\omega_m) \rangle \propto \delta_{mn},$$
 (37)

queda:

$$\langle \tilde{\Phi}(\Omega) \, \tilde{\Phi}(\Omega') \rangle \propto \left| \Gamma\left(i\frac{\Omega c}{a}\right) \right|^2 \exp\left(-\frac{\pi c\Omega}{a}\right) \sum_k \frac{1}{\omega_k} \left(\frac{\omega_k c}{a}\right)^{i(\Omega - \Omega')c/a}, \quad (38)$$

 $\Gamma\left(i\frac{\Omega c}{a}\right)$  es la función Gamma de Euler de argumento complejo. En la ecuación (38) se sustituye la sumatoria por una integral obteniendo:

$$\sum_{k} \frac{1}{\omega_{k}} \left(\frac{\omega_{k}c}{a}\right)^{i(\Omega-\Omega')c/a} =$$

$$\frac{V}{2\pi} \int_{0}^{\infty} dk \frac{1}{\omega_{k}} \left(\frac{\omega_{k}c}{a}\right)^{i(\Omega-\Omega')c/a}.$$
(39)

Mediante el cambio de variables:  $z = \ln (\omega_k c/a)$  [1], se puede llegar finalmente a la relación:

$$\langle \tilde{\Phi} \left( \Omega \right) \tilde{\Phi} \left( \Omega' \right) \rangle \propto \left| \Gamma \left( i \frac{\Omega c}{a} \right) \right|^2 \exp \left( - \frac{\pi c \Omega}{a} \right) \frac{V a}{c^2} \delta \left( \Omega - \Omega' \right).$$
(40)

Las propiedades de la función Gamma de Euler [15, 16] permiten obtener finalmente:

$$\langle \tilde{\Phi}(\Omega) \, \tilde{\Phi}(\Omega') \rangle \propto \frac{a/\Omega c}{e^{-\frac{2\pi\Omega c}{a}} - 1} \delta\left(\Omega - \Omega'\right). \tag{41}$$

Como puede notarse, el término  $\frac{1}{e^{-\frac{2\pi\Omega c}{a}}-1}$  corresponde a una distribución de Bose-Einstein con temperatura  $T_u = \frac{\hbar a}{2\pi k_B c}$ .

REVISTA CUBANA DE FÍSICA, Vol 32, No. 2 (2015)

#### V. DISCUSIÓN

Se obtuvo un resultado completamente análogo al expuesto por Milonni en [1], pero en el caso de un campo de origen puramente clásico. De vital importancia ha sido la forma funcional del espectro del campo a la hora de efectuar los cálculos que conducen a la distribución de Bose-Einstein. Esto quiere decir que el resultado obtenido es consecuencia de las propiedades del espectro del campo estocástico.

El resultado mostrado en (4) ha sido derivado en el caso del campo electromagnético de vacío en varios trabajos [3,7] usando vías diferentes, en este caso se concentra la atención en las propiedades del campo estocástico y se asegura que el resultado no depende de ninguna otra característica especial que posea el campo debido a su naturaleza, en especial de la fuerza de reacción por radiación [3]. La dependencia de la distribución espectral con la frecuencia tiene importantes implicaciones, baste notar que en el caso de la SED, la expresión (4) es proporcional a la densidad espectral de la energía del campo de vacío y se ve que para una adecuada selección de las constantes de proporcionalidad, se recupera el resultado de la Mecánica Cuántica para la energía del vacío. Es por medio de esta relación que la constante de Planck hace su aparición en la SED y en general en cualquier teoría que se base en un campo estocástico de vacío.

La esencia del efecto Unruh es que el observador uniformemente acelerado percibe un vacío completamente diferente del que percibiría un observador en reposo o movimiento rectilíneo uniforme. En la variante del campo estocástico de vacío, ocurre una ruptura en las propiedades de simetría de su espectro (garantizadas por la forma  $\propto \omega^{1/2}$ ) de manera que se obtiene una distribución modulada por un término de Bose-Einstein idéntico al que se obtiene en un estado térmico según la Teoría Cuántica. Es esto lo que permite identificar el término en la exponencial con la temperatura de Unruh  $T_u$ . Es posible establecer una analogía formal entre los ensembles correspondientes a un sistema estocástico y a uno cuántico a partir de comparar la relación (37) con la relación:  $\langle \hat{a}_{k}^{\dagger} \hat{a}_{k'} \rangle = \delta_{kk'}$  que representa el valor de expectación correspondiente al operador número de ocupación correspondiente a un campo cuántico no masivo, siendo  $a_k$  y  $a_k^{\dagger}$  los operadores de aniquilación y creación ya introducidos en (21).

#### VI. CONCLUSIONES

Las propiedades de simetría del espectro del campo estocástico de vacío permiten obtener la forma del espectro

que garantiza matemáticamente la aprición de un término tipo Bose-Einstein que permite identificar la temperatura de Unruh proporcional a la aceleración uniforme. En caso de estar en presencia de un agujero negro, el resultado sería el mismo pero con la aceleración de la gravedad cerca de la superficie del agujero negro en lugar de la aceleración del sistema de Rindler. El resultado obtenido permite dar un paso en la generalización de los métodos de la SED para hacerla menos dependiente de la naturaleza electromagnética del campo que en ella se usa y centrar la atención en conceptos como la simetría del espectro [10].

#### VII. REFERENCIAS

- [1] P. M. Alsing, P. W. Milonni, Am. J. Phys. 72 1524(2004).
- [2] S. Hawking, Nature 248, 30 (1974).
- [3] L. de La Peña, A. M. Cetto, The Quantum Dice, ISBN 978-94-015-8723-5 (eBook), Alwyn van der Merwe, (1996).
- [4] L. de La Peña-Auerbach, A. M. Cetto Jour. Math. Phys. 18, 1612 (1977).
- [5] M. O. Cáceres, Elementos de estadística del no equilibrio y procesos estocásticos, Ed. Reverté, Barcelona (2003).
- [6] M. O. Cáceres, A. A. Budini, J. Phys. A. Math. Gen. 30, 8427, (1997).
- [7] T. Boyer, Phys. Rev. D 11, 790 (1975).
- [8] A. Einstein, L. Hopf, Ann. der Phys. 33, 1105 (1910).
- [9] M. Planck, The Theory of Heat an Radiation, The Project Gutenberg EBook (1914).
- [10] A. Cabo-Bizet, A. Cabo Montes de Oca, Phys. Let. A. 359, 265 (2006).
- [11] H. M. França, quant-ph/ 1207. 4076 v2, (2012).
- [12] T. W. Marshall, quant-ph/ 0203042vl (2002).
- [13] T. W. Marshall, Proc. Roy. Soc. A. 276, 475 (1963).
- [14] H. A. Lorentz, The Theory of Electrons, Dover, New York (1952).
- [15] A. I. Markushevich: Theory of functions of a complex variable (Prentice-Hall, USA, 1965).
- [16] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, Table of integrals, Series and products, Academics Press, New York (1980).

# IMPROVEMENT OF THE FIRST CUBAN LASER DENSITOMETER MEJORAS AL PRIMER DENSITMETRO LÁSER CUBANO

P. J. Larrea-Cox<sup>†</sup>, L. Hernández-Tabares, E. Valdés-Santurio, S. Fernández-Yanes, B. Robaina-Martínez

Centro de Aplicaciones Tecnolgicas y Desarrollo Nuclear (CEADEN). La Habana, Cuba; plarrea@ceaden.edu.cu<sup>+</sup> + corresponding author

Received 3/6/2015; Accepted 4/8/2015

PACS: Optical absorption 42.25.Bs, measurement of density 06.30.Dr, optical instruments 07.60.-j, optical scanners 42.79.Ls

In 1988, the Cuban National Laser Commission started to collaborate with the so-called Biological Front, in order to help substituting imported equipment.

In 1990, at the former Center for Development of Scientific Instruments and Equipment (CEDEIC), the first Cuban semi-automatic Laser Densitometer (LD-01) and its first associated software version (SOFDEN) were built [1].

A densitometer is a device for measuring optical density (OD), based on the photometric principle [2], where the intensity of light after passing through a substance is compared to the incident intensity [3].

The LD-01 is used to perform qualitative and quantitative determinations of various substances (DNA, proteins, enzymes, fatty acids, dyes, etc.). It is based on optical absorption measurements of substrates that permit the transmission of luminous radiation through them. Examples of such substances, are: electrophoretic separations (agarose, starch and polyacrylamide gels, flat and tubular, cellulose acetate films), autoradiograms (X rays), photographs, slides, stains and thin layer chromatography (TLC) plates.

The instrument basically consists in a light source and optical, electronic and mechanical systems. A substrate, coupled to a scanning mechanism, is moved between the light source and the detector. The signal at its output is electronically processed. With a recording module, the density curve is plotted and the area enclosed enables sample quantification.

Sonly the Center for Genetic Engineering and Biotechnology (CIGB) got interested in the LD-01, which satisfactorily passed a battery of tests as an instrument for the evaluation of the purity of different biotechnological products [4].

The LD-01 passed another battery of tests at the Clinical Laboratory of the Abel Santamaria Hospital (Pinar del Rio), this time related to the analysis of blood serum proteins which is the most widespread application. This led to some modifications in hardware and software, achieving metrological certification in the National Institute of Metrology (INIMET).

For more than three years, the LD-01 provided services at the Clinical Laboratory of the Ameijeiras Hospital (Havana), and since 1998 it is being used at the Central Military Hospital (Havana), where it was a key element in the reopening of the

electrophoresis service of serum proteins.

At the beginning of this century, with the disappearance of CEDEIC and its subsequent fusion with the Center for Technological Applications and Nuclear Development (CEADEN), the technical service to the available laser equipment has continued, including densitometers.

Between the improvements made during the last years, are:

- Decrease of the distance slit-sample, which reduces the negative effects of stray light on the photo-detector and the background noise.
- Replacement of the detector (germanium photocell) for a silicon photodiode, with greater sensitivity and linearity.
- Modernization and simplification of the electronic system of the photo-detector.
- Improvement of the correspondence between signals and actual values of absorption or OD [5].
- Increase of the scan length, from 65 to 72 mm in order to evaluate other samples, including cylindrical gels.
- Integration and optimization of subroutines, reducing processing time.
- Replacement of the ISA interface card by a suitable USB interface external module.
- Redesign of the motor control board.
- Development of new software (*CEADEN Soft Visual Densitometer*), compatible with any PC configuration and suitable to be used in virtually any other advanced densitometer [6].

Below, they are provided details of some of the most recent improvements listed above.

The obsolete ISA interface was substituted by an external USB interface [7]. The external module (see top of figure 1) has two connectors: a USB for connecting to the PC and a DB9 for connecting to the LD-01. The module was based on a single PIC18F2550 microcontroller. Through the

DB9 connector the microcontroller receives the analog signal (NA/SGN) and controls the motor rotation direction (figure 3). A small change in the densitometer hardware was made to split the motor control signal into two separate ones (BK1 and BK2).



Figure 1. LD-01 laser densitometer. Note the USB external module over the instrument.

The module gets the analog signal from the densitometer, converts it to a digital one and sends it to a PC. On the other hand, from the PC the LD-01 receives commands to stop, move or change direction of the motor.

The analog signal is proportional to the measured OD and is digitized by an internal PIC (10 bit ADC). To match the 4 VDC output signal (equivalent to 4 OD) to the ADC 2.5 VDC external reference, a resistor divider R3-R4 was used.

According to calibration, figure 2 shows the linearity of the instrument measurements vs. standard neutral density filters. The correlation coefficient of the linear fit is 0.9987.



Figure 2. Linearity of response in the measurement range (0-4 OD).

The CEADEN Soft Visual Densitometer is general purpose software, made for the LD-01 densitometer (figure 4). This software offers a user interface and automation which improves the capabilities of the device, such as

controlled motor movement direction with and without data acquisition, time of movement, and number of samples to read.

The LD-01 densitometer communicates with the PC trough an USB 2.0 interface with serial port virtualization. Data post-processing like curve smoothing, peak detection, calculation of areas and protein quantization, can be performed after data acquisition. All of these are tweaked by some parameters that the user can vary. The software brings a report with graph and peaks data that the user can print or save as a PDF file. In the case of standards, it also allows the obtainment of calibration curves by molecular weight or concentration very useful in several applications.

In summary, the LD-01 continues to meet the requirements of its original main application: the analysis of protein electrophoresis of serum in Clinical Laboratories. However, nowadays it has been updated to meet contemporary standards. It constitutes an excellent example of how Cuban Physics and Engineering are able to successfully insert products in the healthcare and biotechnology scenarios.

#### REFERENCES

- P. Larrea, F. Dina, A. Escobar, A. Korenchenko, M. Cobas, et al.. Densitómetro Lser LD-01. Rev. CNIC 21, 1 (1990) 38.
- [2] H. H. Willard, L. L. Merritt, and J. A. Dean. Instrumental Methods of Analysis, 3rd. Ed. (1965).
- [3] G. S. Lándsberg. Óptica T. 2, Ed. Mir, Mosc (1976).
- [4] P. Larrea, J. López, T. Currás, E. Amador, M. Cobas, and F. Dina. Análisis comparativo de tres densitómetros para control de calidad. Adv. in Modern Biotech. 1 (1992) 23.13.
- [5] P. Larrea, L. Hernández, C. Suárez, A. Vázquez, M. de los Reyes. Evaluación de densitmetro automático con diodo láser. Rev. Cub. Fís. 27, 1 (2010) 102.
- [6] P. Larrea, L. Hernández, N. López, H. Fernández, J. Arteche, and A. Combarro. "Development of an Automatic Densitometer with Diode Laser". Proceedings of TECNOLASER2007. ISBN-959-7136-48-1.
- [7] J. Axelson. USB complete: Everything you need to develop custom USB peripherals, 2nd Ed.. Madison: Lakeview Research (2001).



Figure 3. Electronic diagram of the USB interface external module.



Figure 4. Viewport (Graph) displaying one typical curve and the results of densitometric analysis.

# SOLAR FIBER BURSTS DYNAMIC: REGULAR, DETERMINISTIC CHAOS OR STOCHASTIC DINÁMICA DE EXPLOSIONES SOLARES FIBER: REGULAR, CAOS DETERMINÍSTICO O ESTOCÁSTICA

L. CUENDIAS PÉREZ<sup>a</sup>, A. L. MÉNDEZ BERHONDO<sup>a</sup> AND A. K. Díaz Rodríguez<sup>a,b†</sup>

a) Astronomy Department, Institute of Geophysics and Astronomy
 b) Institute of Astrophysics of Andaluca (CSIC); akdiaz@iaa.es<sup>+</sup>
 + corresponding author

Received 10/9/2014; Accepted 5/1/2015

PACS: Solar physics, 96.60.-j; Time series analysis in non linear dynamics, 05.45.Tp; Chaos low-dimensional, 05.45.Ac.

The dynamic characteristics of solar fiber metric radio bursts as they evolve at fixed frequency are examined. Fiber bursts appear as highly structured in time series of emission and absorption with respect to the underlying continuum. The aim of this work is to determine if the primary process generating fiber bursts can be described as a deterministic chaos.

We use the data recorded by the radiopolarimeter of the Trieste Solar Radio System (INAF, Trieste Astronomical Observatory) at 327 MHz from 09:42:51 to 09:44:11 UT when a well-defined cluster of fiber bursts is present. The time resolution of the data is 10 ms.

We apply the time series analysis developed in the theory of non-linear dynamics systems in order to find out if the time series of solar fiber bursts is regular, deterministic chaos or stochastic. From the Takens embedding theorem [1], a single time series contains information on the entire system it originates from. According to that, the dynamics of such system can be reconstructed in its state-space through the  $\epsilon$ -dimensional vector **X**<sub>t</sub> as

$$\mathbf{X}_{\mathbf{t}} = (x_t, x_{t+\tau}, \dots, x_{t+\tau(\epsilon-1)}), \tag{1}$$

where t represents the time and  $x_t$  is the measured value at time t,  $\tau$  represents the time delay (any multiple of time resolution), and  $\epsilon$  is the embedding dimension of the system.

The mutual information was used to find the proper time delay in order to reconstruct the state-space [2]. Figure 1 shows the reconstructed 2-dimensional state-space with a time delay of 40 data points as suggested by the first minimum of average mutual information. From the limit asymptotic sets of trajectories the presence of attractor can be inferred.

The strangeness of the attractor can be measured through correlation dimension  $D^{(2)}$  which is a suitable parameter to explore how deterministic a process is [3]. The Grassberger-Procaccia algorithm is an useful tool to find out  $D^{(2)}$  via the correlation integral,  $Cd^{(2)}(r)$ , where  $D^{(2)}$  is defined as  $Cd^{(2)}(r) rD^{(2)}$  and can be estimated as the slope in the linear

scaling region independent of the embedding dimension  $\epsilon$  in the log[ $Cd^{(2)}(r)$ ] vs. log[r] plot [4].



Figure 1. Reconstructed state-space of the analyzed series of fiber bursts.

Figure 2 shows the plots of  $\log[Cd^{(2)}(r)]$  vs.  $\log[r]$  for embedding dimension e from 2 to 15 for the time series corresponding to state-space of Figure 1. A linear scaling region independent of the embedding dimension can be noticed for  $7 \le e \le 15$  in the range  $-1.4 \le \log[r] \le -0.8$ . The slope in this linear scaling region indicates  $D^{(2)} = 1.2 \pm 0.2$ .

The value for  $D^{(2)} = 1.2$  indicates a process for solar fiber bursts characterized by a low-dimensional deterministic chaos. This value for  $D^{(2)}$  is similar to some of the well-know attractors, e.g., Henon and Rssler models.

The dynamics in the generation of solar fiber bursts studied in this paper can be characterized by a low dimensional chaotic process. It means a non-periodic behavior with sensitive dependence on initial conditions. This non-periodic chaotic behavior is in contrast with a developed model suggesting an oscillatory cuasi-periodic process acting as fiber bursts source [5].



Figure 2. Plots of  $\log[Cd^{(2)}(r)]$  vs.  $\log[r]$  for embedding dimension *e* from 2 to 15 for the time series corresponding to state-space plotted in Figure 1.

The value for  $D^{(2)} = 1.2$  indicates a low degree of freedom sufficient to describe the dynamics of the system and consequently the number of independent non-linear equations needed to specify its evolution is rather low. At least 2 non-linear equations are necessary to describe the process generating the cluster of fiber bursts considered in this paper.

The found value for  $D^{(2)} = 1.2$  is quiet different and

significantly low respect to the value found for other types of highly structured in time series of solar bursts like pulsations, Type I bursts, and millisecond spikes for which were found  $D^{(2)} \ge 5$  [6,7] meaning, in contrast, a high dimension chaos.

This difference in the value for  $D^{(2)}$  between fibers and other types of solar bursts highly structured in time suggest that the nature of fragmentation in the source of radio emission can be completely different from one type to another, making a differentiation between fibers and the others mentioned type of bursts. This could be an important feature to take into account for theoreticians constructing models explaining the fiber bursts and the nature of the fragmented radio emission.

#### REFERENCES

- [1] Takens, F., Lect. Notes Math. 898, 366 (1981).
- [2] Fraser, A. M., and H. L. Swinney, Phys. Rev. A 33, 1134 (1986).
- [3] Eckmann, J. P., and D. Ruelle, Rev. Mod. Phys. 57, 617 (1985).
- [4] Grassberger, P., and I. Procaccia, Phys. Rev. Lett. 50, 346 (1983).
- [5] Kuznetsov, A. A., Sol. Phys. 237, 153 (2006).
- [6] Isliker, H., and A. O. Benz, Astron. Astrophys. 285, 663 (1994).
- [7] Veronig, A., M. Messerotti, and A. Hanslmeier, Astron. Astrophys. 357, 337 (2000).

# SISTEMA OPTO-MECÁNICO PARA EL CRECIMIENTO CONTROLADO DE PILAS GRANULARES OPTO-MECHANICAL SYSTEM FOR THE CONTOLLED GROWTH OF GRANULAR PILES

L. Domínguez-Rubio, E. Martínez<sup>†</sup>y E. Altshuler

Grupo de Sistemas Complejos y Física Estadística, Facultad de Física, Universidad de La Habana, 10400 La Habana, Cuba; emartinez@fisica.uh.cu<sup>+</sup>. + autor para la correspondencia

Recibido 10/10/2015; Aceptado 10/11/2015

PACS: 45.70.Cc, 07.50.Qx, 07.07.Tw, 07.10.-h

Los medios granulares exhiben una notable ubicuidad en la vida humana: alimentación, industria y naturaleza son áreas donde es relevante su presencia [1–3]. También en las ciencias básicas son de utilidad, por ejemplo, al establecer analogías con eventos que ocurren en sistemas como los superconductores o el tráfico urbano [4,5].

Una configuración de granos que ha tenido mucha popularidad en la investigación y en la técnica es la pila cónica de arena. Se le puede encontrar en escenarios que van desde el almacenamiento de minerales, hasta el estudio de la criticidad autoorganizada [1,6–9]. Mucho se ha investigado para conocer los detalles de su proceso de formación, aunque solo en configuraciones cuasi-bidimensionales se ha establecido rigurosamente una dependencia del comportamiento de la pila en crecimiento con parámetros como el flujo de entrada y la altura desde la cual se depositan los granos [9–11]. Sin embargo, los dispositivos que se han empleado para controlar experimentalmente a este último parámetro son poco precisos y dependen de un criterio de apreciación, porque se operan manualmente [10, 11]. Los experimentos confirman que parámetros como el ángulo de reposo, que se puede definir como la inclinación de la superficie libre de la pila respecto a la horizontal [1,10] y que es una medida de la fricción interna de la pila, dependen de la altura de deposición de los granos [10]. Ello indica la necesidad de ejercer un control automatizado de la altura de deposición y su influencia en las propiedades de la pila.

El objetivo de esta investigación es diseñar y evaluar un sistema que permita el control automático y preciso de la distancia entre el ápice de la pila y el punto desde donde se vierten los granos. Se empleará el procesamiento de imágenes como herramienta para cuantificar los resultados y evaluar las fuentes de incertidumbres que posee el sistema. El principio de funcionamiento del mecanismo de control de la altura es la obstrucción por la pila de una señal luminosa láser. Así se indica que la separación entre el ápice de la pila y el punto desde donde se vierten los granos es menor que el valor prefijado, y debe elevarse la posición del sistema de suministro para mantener esa altura constante. sistema de control: El contenedor (1) suministra el material granular (arenas de diversos tipos) a través de un orificio con diámetro variable. Al crecer la pila (2) se interrumpe el haz del láser (3) y el circuito de control (4) activa el motor (5) que hace girar la polea (6) y asciende el contenedor hasta que vuelve a llegar luz al sensor. Para asegurar que no deslice la correa en el eje del motor y aumentar la precisión del movimiento ascendente del contenedor se coloca el contrapeso (7). El crecimiento de la pila es registrado por las cámaras (8) y (9) las cuales graban, respectivamente, la base y el perfil lateral de la pila. Con este dispositivo se pueden regular los parámetros esenciales que controlan la dinámica de la formación de las pilas: flujo de suministro de granos y altura de deposición. La cámara (9) será utilizada para evaluar la efectividad del sistema de control de altura de suministro, como veremos más adelante.

El diseño del circuito de control es también muy simple: al obstruirse el haz láser que incide en el fotodiodo, este deja de conducir y la corriente va a la base del transistor; se establece entonces una corriente emisor-colector que pasa por el *relay* que cierra el circuito del motor. Cuando el motor gira, sube el contenedor hasta que el láser sobrepasa el ápice de la pila que lo de modo que vuelve a incidir en el fotodiodo. Este lleva la corriente de base a tierra y se elimina su paso por el transistor. El *relay* abre entonces el circuito del motor y el contenedor deja de subir.

Para evitar que la columna de granos obstruya al haz láser y el sistema suba independiente de las variaciones del ápice de la pila se coloca al sistema láser-sensor desplazado lateralmente del chorro como se muestra en la figura 1b. Esto implica que no se registren las variaciones exactamente del ápice de la pila, el cual se ubica en el centro de la columna. Debido a los choques de los granos, el tope de la pila es frecuentemente un plateau y en su borde se puede ubicar el eje del sistema sensor-láser: se establece así un punto de referencia desplazado lateralmente respecto al ápice y, cuando no sea un plateau el tope, estará en una posición inferior. La distancia entre el punto de referencia y la abertura será la altura que se debe mantener constante, denominada como altura de suministro.

Existen inestabilidades mecánicas en el sistema que pueden ser reducidas al ajustar con un tornillo el sistema que sube con la polea, al aumentar la inercia del sistema adicionándole peso y al fijar este de forma que se reduzcan las vibraciones del láser y el sensor.



Figura 1. Esquema del dispositivo experimental. a) Diagrama de las partes componentes del sistema de control: (1) contenedor con apertura de diámetro variable, (2) pila de granos, (3) haz láser, (4) circuito de control, (5) motor, (6) polea, (7) contrapeso, (8) y (9) cámaras. b) Vista lateral de la pila de granos donde se muestra el haz láser desplazado lateralmente respecto a la columna de granos sobre una región del borde de la pila que sirve como punto de referencia. El ápice puede estar aplanado a causa del impacto de los granos.

Una limitación del método es que el dispositivo solo tiene un movimiento ascendente y regula variaciones en la altura prefijada cuando el valor es menor que el establecido por la distancia abertura-punto de referencia. Esta dificultad impone que las fluctuaciones en la dirección vertical "medidas respecto a tierra" de este punto de referencia, deben tributar a la incertidumbre con la que se computa la altura de suministro. No es conveniente, además, que el dispositivo reproduzca los movimientos de ascenso y descenso del tope de la pila porque podrían inducirse inestabilidades en el flujo de granos. Otro problema que pudiera afectar el buen funcionamiento del equipo es la variación del ritmo de suministro debido a la velocidad a la que ocurre el ascenso. Para poder cuantificar adecuadamente esta problemática hay que evaluar en detalle al dispositivo al probar con varias velocidades del motor y diferentes configuraciones.

Con los videos del crecimiento de las pilas se obtiene el valor de la altura de deposición y su rango de incertidumbre. Se escribió un programa en C++ utilizando la biblioteca de visión por computadoras *OpenCV* para el procesamiento de los videos. El programa binariza las imágenes de las pilas y, mediante la construcción del diagrama espacio-temporal que se muestra en la figura 2, se puede conocer la distancia desde el punto de referencia de la pila hasta la abertura para cada cuadro del video. Se evaluará ahora la efectividad de nuestro sistema mediante el análisis sistemático de imágenes laterales de videos donde se registran las posiciones respecto a tierra de la abertura, del ápice de la pila y del punto de referencia sobre su superficie. A este proceso contribuyen principalmente dos fuentes de incertidumbre:

- las fluctuaciones en la separación entre la abertura y el punto de la superficie de la pila que el láser utiliza como referencia
- la incertidumbre asociada al procesamiento de video, cuyo valor más importante está dado por el cómputo del umbral para convertir las imágenes a blanco y negro.

Es fácil demostrar que las incertidumbres en el proceso de binarizar las imágenes pueden no considerarse: el cambio de los umbrales de binarización en un rango amplio arrojó diferencias de alturas del orden de 2 píxeles, equivalentes a menos de 1 mm en el experimento real. Este valor es menor que las fluctuaciones en la altura del punto de referencia en la pila respecto a tierra, con un valor de aproximadamente 3 mm. El análisis de los videos nos permitió determinar la evolución temporal de la distancia entre la abertura y el punto de referencia utilizado por el haz de láser para así computar sus fluctuaciones y compararlas con el valor medio de la distancia abertura-punto de referencia.

El diagrama espacio-temporal que se ilustra en el panel inferior de la figura 2 muestra, a través del ancho de la franja negra, la evolución de la distancia abertura-punto de referencia de la pila. Los gráficos de la figura ?? exhiben la evolución de la distancia hallada a través de los diagramas espacio-temporales para diversos flujos de entrada (0.6 g/s, 5.2 g/s, y 11.4 g/s) y para diversas alturas medias. Para las configuraciones graficadas en la figura 3 las fluctuaciones son menores que el 10% de la distancia abertura-punto de referencia en los casos 1, 2 y 3. Sólo en el caso 4 estas fluctuaciones son comparables con la distancia media, lo que indica que el control no es confiable. Sin embargo, la situación ilustrada en 4 es completamente esperable porque se trata de una distancia abertura-punto de referencia del orden del ancho del haz láser utilizado. Para el material que hemos utilizado (arena sílice) la incertidumbre relativa es menor del 10% para alturas mayores que 4 mm, que se corresponde con el diámetro del haz láser.

Al determinar la evolución temporal de las trayectorias verticales de la abertura y del punto de referencia se

puede comprobar que ambas coinciden y esto sirve como legitimación adicional del buen funcionamiento del dispositivo.



Figura 2. En el panel superior se muestra un cuadro binarizado del video que registró el crecimiento de la pila. Para la construcción del diagrama espacio temporal del panel inferior se toma como referencia la línea vertical que aparece sobre la imagen de la pila.

Los puntos experimentales, en la figura 3, están dispersos alrededor de un valor constante de la altura de suministro y puede establecerse una analogía entre estos gráficos y señales con ruido. Esto facilita la comparación entre esta dispersión y las fluctuaciones de los diagramas espacio-temporales. Así podrá determinarse cuál factor es el que tributa más significativamente a la incertidumbre de la altura de suministro, si las deficiencias en el sistema electromecánico o las fluctuaciones del tope de la pila producto al impacto de los granos. Puede identificarse que las fluctuaciones de la trayectoria del punto de referencia existen durante todo el experimento a diferencia de las de la abertura, que no son detectables en la región del plateau. De esta forma se confirma que el elemento que más tributa a la dispersión de los puntos experimentales de la altura de suministro son dichas fluctuaciones del punto de referencia.

Probar la efectividad de este sistema electromecánico para el control preciso de la altura de suministro de granos permitirá evaluar, de manera controlada, la influencia de los cambios de esta magnitud en las características y la dinámica de crecimiento de las pilas. Su aplicabilidad puede extenderse a configuraciones cuasi-bidimensionales, donde también el dispositivo opera con éxito según las experiencias más recientes de nuestro grupo de investigación.



Figura 3. Valores medidos de la altura de suministro y el ajuste teórico a una constante para diferentes flujos de entrada de granos.

REFERENCIAS

- B. Andreotti, Y. Forterre y O. Pouliquen, Granular media (Cambridge University Press, Cambridge, Reino Unido, 2013).
- [2] J. Tejchman, Confined Granular flow in Silos: Experimental and Numerical Investigations (Springer International Publishing Switzerland, Suiza, 2013).

- [3] S. J. Antony, W. Hoyle y Y. Ding (Editores), Granular Materials: fundamentals and applications (The Royal Society of Chemistry, Cambridge, Reino Unido, 2004).
- [4] E. Altshuler y T. H. Johansen, Rev. Mod. Phys. 76, 471 (2004).
- [5] E. Altshuler et al, Phys. Rev. Lett. 86, 5490 (2001).
- [6] I. Aranson y L. S. Tsimring, Rev. Mod. Phys. 78, 641 (2006).
- [7] E. Altshuler et al, Phys. Rev. Lett. 91, 014501 (2003).
- [8] E. Martínez et al, Phys. Rev. E 75, 031303 (2007).
- [9] E. Altshuler et al, Phys. Rev. E 77, 031305 (2008).
- [10] Y. Grasselli et al, Granular Matter 2, 97 (200).
- [11] Y. Grasselli y H. Herrmann, Physica A 246, 301 (1997).
- [12] B. Jähne, Digital Image Processing, 6th edition (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Alemania, 2005).

# EL DESARROLLO DE LA INVESTIGACIÓN EN ÓPTICA EN CUBA OPTICS RESEARCH IN CUBA

V. Fajer<sup>a</sup> y M. Sánchez <sup>+b</sup>

a) Editor Revista Cubana de Física

b) Facultad de Física, Universidad de La Habana, Cuba; maruchy@fisica.uh.cu<sup>+</sup>

+ autor para la correspondencia

Received 15/11/2015; Accepted 1/12/2015

Celebrando la designación de 2015 como año internacional de la luz y las tecnologías basadas en la luz, se presenta un resumen de la investigación en el campo de la óptica en Cuba. Se exponen los principales resultados alcanzados en las instituciones que realizaron o realizan investigaciones en el campo de la Óptica en el país, y se han colocado en un contexto histórico.

Celebrating the designation of 2015 as the International Year of Light and Light-based Technologies, an overview of the research in the field of optics in Cuba is presented. The main results achieved in the institutions that have done research in the field of optics in the country are described and put into an historical context.

PACS: Optics, 42, History of science, 01.65.+g; Science and society, 01.75.+m

La investigación en óptica en Cuba como en la Física en general, es relativamente joven y comienza a partir de la década del 60 del siglo pasado [1].

Un hecho determinante en el desarrollo de la Física en Cuba fue la reforma universitaria llevada a cabo en el país en el año 1962, fecha en que se crean la Escuela y la Carrera de Física en la Universidad de la Habana (UH). La Escuela, que se transformó más adelante en Facultad, ha jugado un papel trascendental en la formación de una buena parte de los Físicos Cubanos en los pasados 50 años.

En la década del 70 del siglo XX se forman grupos de investigación en óptica en diferentes instituciones del país. Entre estos se destaca el grupo del Instituto Superior Politécnico José Antonio Echeverría (IPSJAE) pionero en los trabajos de Óptica Coherente y que se convirtió en el polo más fuerte en la investigación en óptica en el país, llegando a tener un programa de Maestría en este campo. También se crearon centros dedicados a la investigación y al desarrollo de las aplicaciones de la Óptica, como el Buró Especial para la Construcción de Instrumentos Científicos con Producción Adjunta (BECICPA), que después se convirtió en el Centro de Desarrollo de Equipos e Instrumentos Científicos (CEDEIC) y finalmente se integró al Centro de Aplicaciones Tecnológicas y Desarrollo Nuclear (CEADEN), que tuvieron y aún mantienen un importante impacto en el desarrollo e introducción de instrumentos ópticos en el país.

La investigación en óptica y el desarrollo de sus aplicaciones alcanza su momento de máximo esplendor en el país en la década del 80 del siglo XX. Sin embargo, en 1991 comienza el "Período Especial": denominación oficial de una larga etapa de crisis económica originada por el desastroso efecto que tuvo la desintegración de la URSS y el derrumbe del socialismo europeo sobre la economía y las condiciones de vida de los cubanos. Cuba se tuvo que enfrentar a la súbita desaparición de sus mercados, fuentes de

abastecimiento y créditos, así como al recrudecimiento del bloqueo norteame-ricano mediante las leyes Torricelli (1994) y Helms Burton (1996).

En consecuencia, la investigación científica en el campo de la Física y en Óptica en particular sufrió un fuerte impacto del que lamentablemente no se ha recuperado.

En este trabajo se presenta un resumen del desarrollo de la investigación en el campo de la óptica y sus aplicaciones en Cuba y se exponen los principales resultados alcanzados en las instituciones que realizaron o realizan investigaciones en este campo en el país.

#### I LOS INICIOS EN LA UNIVERSIDAD DE LA HABANA

A partir de la ya mencionada reforma universitaria de 1962, se crean la Carrera de Física y la Escuela de Física de la Universidad de la Habana. Anteriormente existían las Escuelas de, Física- Matemática y la de Química-Física; dedicadas prácticamente a la formación de profesores para el nivel preuniversitario.

La reforma introdujo la investigación científica en las carreras universitarias, bajo la premisa de que esto era imprescindible para garantizar una docencia de calidad. En la Escuela de Física de la UH se decide priorizar como línea de investigación la física del estado sólido. En este empeño se contó con una fuerte colaboración internacional. Científicos de países como Francia, Italia, Inglaterra, México y Argentina, vinieron a la Escuela de Física en la década del 60 a impartir cursos y ayudaron a desarrollar los primeros laboratorios de investigación.

Entre los trabajos desarrollados se destacan los realizados en la caracterización óptica de semiconductores que condujeron a las primeras publicaciones en revistas científicas internacionales [2,3].

En la década del 70 del siglo XX se hace énfasis en la

Optoelectrónica, para lo que se contó con el apoyo del Dr. Z. I. Alferov (premio Nobel 2000) del Instituto Ioffe de San Petersburgo. En la década del ochenta se alcanza la madurez de las investigaciones en materiales y dispositivos optoelec-trónicos y en los laboratorios de la Escuela de Física se obtuvieron fotodiodos de silicio, diodos emisores de luz (DELs) [4] y diodos láser [5].

Los primeros DEL de infrarrojo cercano basados en arseniuro de galio fueron obtenidos en el grupo de la Dra. Elena Vigil y los primeros láseres por el grupo del Dr. Pedro Díaz (1943-2004). El grupo de láseres semiconductores se mantiene hasta hoy realizando investigación básica en este campo.

En 1993 y 1998 se organizan en la Universidad de la Habana el primero y segundo Workshop on Optoelectronic Materials and their Applications, por el Dr. Osvaldo de Melo y la Dra. María Sánchez, respectivamente.



Figura 1. Foto tomada en entrada de la Facultad de Física de la Universidad de la Habana durante la clausura del "1st Workshop on Optoelectronic Materials and their Applications", celebrado en esta institución en noviembre de 1993.

#### II EL INSTITUTO TÉCNICO MILITAR

La Cátedra de Física del Instituto Técnico Militar, "José Martí" fundado en la Habana en 1967, realizó un significativo aporte al desarrollo de la Óptica en Cuba. En este centro se realizaron trabajos en holografía y comunicación óptica. Se trabajó en el diseño de moduladores de interrupción (Q-switching) empleando dispositivos electro-ópticos con neobato de litio y magneto-ópticos con molibdato de plomo. También se realizaron investigaciones sobre reconocimiento multiespectral. En este centro se diseño y construyó en 1974 un láser de CO2. El grupo estuvo compuesto entre otros por los físicos Carlos Alvarez, Ramón Buergo, Miguel A. García, Edwin Pedrero, Juan Monzón y Mercedes Carnero.

## III GRUPO DE ÓPTICA DEL ISPJAE

En 1975 se crea, en el Departamento de Física de la Escuela de Ciencias Básicas del ISPJAE, un pequeño grupo de investigación con la idea de construir un láser de colorante

empleando rodamina 6G. Aunque este láser no logró fabricarse completamente, sirvió para ganar experiencia en el diseño y construcción de de los diferentes láseres que se desarrollaron posteriormente, en la década de los 80 del siglo XX [6]. Varios de los integrantes del grupo hicieron entrenamientos y estudios de doctorado en la desaparecida Unión Soviética.

A partir del desarrollo alcanzado y a propuesta del Dr. Ángel Augier, en 1983 se crea la Unidad de Ciencia y Técnica (UCT) "Óptica Coherente" dentro de la Facultad de Ingeniería Electrónica del ISPJAE.

Se abordaron varias líneas de trabajo: el diseño y construcción de láseres, la Holografía, las técnicas de Speckle o moteado y la comunicación óptica.

En el año 1988, se construye en el IPSJAE el primer bisturí laser de CO2. Se hicieron 2 bisturíes láseres (BL1 y BL2) con una potencia de 40 W de salida que se utilizaron para realizar operaciones de cirugía general, necrectomías y otras en el Hospital docente "General Calixto García Iñiguez" de la ciudad de la Habana.

Posteriormente se diseñaron y construyeron láseres de neodimio-YAG en regímenes de generación libre y de sincronismo de modos, de rubí con generación libre de pulsos de 0.5 J y un conmutador pasivo de centros de color, que fue utilizado para realizar hologramas. Se construyó también una Instalación Tecnológica Láser denominada ITELA de 400 W de potencia.

Los trabajos de fabricación de láseres se llevaron a cabo bajo la dirección del Dr. Luis Martí López fallecido repentinamente en 2011, quien recibió de manera póstuma la Orden Carlos J. Finlay en el año 2012.

En la línea de Holografía (técnica de realización de imágenes tridimensionales), se destacan los trabajos realizados por la Dra. Beatriz Moreno quien creó un laboratorio de Holografía en el Museo de Bellas Artes y encabezó el grupo que hizo el registro de los hologramas de algunas reliquias que pertenecieron al Lugarteniente General Antonio Maceo y Grajales y de la medalla del Premio Nobel de Literatura de Ernest Hemingway. También se desarrollaron técnicas de Speckle para el estudio de sistemas mecánicos.

Adicionalmente se realizaron trabajos en el procesamiento digital de imágenes y la comunicación óptica. Empleando diodos emisores de luz infrarroja, se creó un canal de comunicación entre las oficinas centrales de la Academia de Ciencias de Cuba, en el edificio del Capitolio y otras instituciones de la Academia.

El grupo también hizo importantes aportes en la formación de recursos humanos, así en 1979 el ISPJAE abrió una especialidad de posgrado en Holografía Láser, y en el año 1995 un programa de Maestría en Óptica, único en el país, del que se realizaron al menos dos ediciones.

#### IV EL PROGRAMA ESPACIAL INTER-COSMOS

Durante el vuelo Espacial Conjunto Soviético-Cubano, que tuvo lugar del 18 al 26 de septiembre de 1980 a bordo de la nave Soyuz-38, cuatro de los 20 experimentos realizados fueron diseñados por físicos e ingenieros cubanos.

En particular, el experimento "HOLOGRAMA", nacido en el Instituto de Investigación Técnica Fundamental (ININTEF) de la Academia de Ciencias de Cuba, bajo el liderazgo científico de Roberto Homs, es prueba del desarrollo alcanzado en la investigación en óptica en el país. Aunque el experimento no se pudo realizar en el vuelo de 1980, se realizó en dos partes, una a fines de 1980 en la estación orbital soviética Saliut-6 y la última, en marzo de 1981, durante el siguiente vuelo conjunto del Programa Intercosmos. La primera parte consistió en la transmisión de información holográfica entre la estación y la tierra por una canal de TV, y la segunda en la toma de imágenes 3D del proceso de disolución de sal en un líquido, para el estudio de la dinámica del proceso [7].

## V LA UNIVERSIDAD DE ORIENTE

La Universidad de Oriente (UO) fue pionera en el desarrollo de la Óptica y la Espectroscopia en Cuba. En esta institución se abren las carreras de Física-Matemática y Química-Física en el año 1956.

En marzo de 1970 se oficializa la Escuela de Física de la UO en coincidencia con la primera y única graduación de 19 Ingenieros Físicos en este centro. La Escuela contaba con cinco Departamentos, uno de ellos dedicado a la Óptica y la Espectroscopia bajo la dirección del Dr. Miguel Catasús.

La Escuela fue creciendo y ganando en nivel científico con la incorporación al claustro de varios Licenciados en Física de la Universidad de La Habana y gracias a la colaboración con la Universidad Estatal de Leningrado y la Universidad Técnica de Dresden. En la primera de estas se formó el Dr. Jorge O. Ricardo Pérez bajo cuya dirección se realizaron los primeros trabajos de investigación en Óptica en la UO.

Muestra del desarrollo alcanzado por la Física en la UO fue la realización en Santiago de Cuba, en el mes de junio de 1985, del III Simposio de la Sociedad Cubana de Física, único que se ha realizado fuera de la capital.

Después de varios cambios de estructura, se crea, en 1991, la Facultad de Ciencias Naturales y Matemáticas de la UO, dentro de la que estaba el Departamento de Física con la carrera de Licenciatura en Física. A partir de 1993, el antiguo grupo de Óptica y Espectroscopia, se transformó en uno de Fluorescencia y Aplicaciones del Láser dirigido por el Dr. Jorge Ricardo. Para los trabajos de Fluorescencia se desarrolló un láser de flujo de nitrógeno y un espectrofluorímetro automatizado. En el proyecto trabajaron Rafael Mut y el Dr. Alexander Fernández.

En el año 1999 se comienza a trabajar en Holografía Digital (HD) en colaboración con el centro de Ingeniería Naval y Oceánica (CENO) de la Universidad de Sao Paulo (USP),

Brasil. Al grupo se incorpora Francisco Palacios, responsable principal del desarrollo del software para la reconstrucción digital de imágenes.

La colaboración con la USP se mantiene hasta hoy y ha dado lugar, entre otros resultados, a numerosas publicaciones científicas, véanse por ejemplo, [8,9].

Posteriormente se trabaja en Microscopia Holográfica Digital (MHD) y se desarrolló el software "Holodig" que permite realizar casi la totalidad de tareas necesarias de HD y MHD. El grupo recibió en 2010 el "Premio Nacional de la Academia de Ciencias de Cuba" por el trabajo integral desarrollado en el campo de la Holografía.

## VI EL INSTITUTO DE GEOFÍSICA Y ASTRONOMÍA

El Instituto de Geofísica y Astronomía (IGA) es el principal instituto de astronomía en Cuba y se crea en 1974 a partir de la unificación de los departamentos de geofísica y de astronomía de la Academia de Ciencias de Cuba que habían sido fundados de manera independiente en el año 1964. El departamento de Astronomía estaba formado por 20 personas que de forma no muy regular estaban vinculadas al antiguo Observatorio Nacional que contaba con un telescopio refractor de 10 pulgadas. En el año 1970 se instalan los primeros radiotelescopios con los que se realiza, por primera vez en Cuba, la observación de un eclipse solar en varias bandas.

De 1974 a 1990 el IGA mantuvo una estrecha relación con varias instituciones del campo socialista, especialmente de la antigua Unión Soviética, y se instalan numerosos equipos como la estación de registro Faraday, la estación telemétrica para la recepción de satélites, estaciones de sondeo inclinado de la ionosfera, estación de rastreo de satélites, transmisor de ondas cortas, analizador espectral, entre otras [10].

En la actualidad el instituto está dividido en cuatro departamentos, uno de los cuales es del de Astronomía, con unos 20 miembros. Su trabajo está altamente enfocado hacia las áreas de la astronomía que se introdujeron durante la época de la colaboración con la Unión Soviética: la radio astronomía solar, espectroscopia óptica solar, observación de satélites, así como el desarrollo de problemas de astronomía computacional [11].

## VII EL CENTRO DE DESARROLLO DE EQUIPOS E INSTRUMENTOS CIENTÍ-FICOS (CEDEIC)

En el año 1978 se crea el Buró Especial de Construcción de Instrumentos Científicos con Producción Adjunta conocido por BECICPA, con el objetivo indicado en su largo nombre. Esto respondió al interés del Consejo de Ayuda Mutua Económica (CAME) de los países socialistas, al que Cuba se había integrado en 1976, de crear vínculos directos entre los institutos de investigación y los centros de producción para acelerar la introducción de los avances de la ciencia y la técnica en la sociedad. Esta institución partió de cero en cuanto a infraestructura por lo que los primeros años se dedicaron a la compra de equipos, materiales y máquinas herramientas para el montaje de los laboratorios y el taller de producción.

En 1986 el BECICPA cambió su nombre por el de Centro de Desarrollo de Equipos e Instrumentos Científicos (CEDEIC) teniendo entre sus objetivos desarrollar investigaciones relacionadas con el láser y sus aplicaciones, concebir equipos científicos basados en las investigaciones desarrolladas, lograr su introducción en la práctica y contribuir a orientar la política nacional relacionada con el láser, la óptica y sus aplicaciones entre otros.

Atendiendo a estos objetivos se organizó una actividad a ciclo completo de investigación, diseño, producción y comercialización de instrumentos y equipos basados en la óptica y el láser, la electrónica y la mecánica de precisión. Se montaron cuatro laboratorios de óptica, un taller de maquinado y otro de montaje de equipos, en un viejo edificio en La Habana Vieja correspondiente al antiguo colegio de Belén.

A finales de los años 80 del siglo XX, en el CEDEIC se habían diseñado, construido y puesto en uso varios equipos. Uno de los que tuvo un mayor impacto fue la serie LASERMED compuesta por equipos de fisioterapia y acupuntura láser, que permitieron sustituir las clásicas agujas de acupuntura. El LASERMED fue diseñado por José L. Díaz y Andrés Combarro, entre otros colaboradores.



Figura 2. LASERMED 401. Equipo de fisioterapia y acupuntura desarrollado en el CEDEIC que empleaba un diodo láser infrarrojo como fuente luminosa.

También se diseñaron y construyeron una serie de polarímetros de la serie LASERPOL. El polarímetro digital LASERPOL 101, diseñado por el Dr. Víctor Fajer, el Ing. Nicolás Duarte y el Ing. José Chao, era un equipo analítico empleado en la medición de glucosa en la orina que casi no empleaba reactivos químicos, constituyendo la alternativa más económica de control de este indicador para la realización de análisis masivos. El equipo se introdujo en el Centro Antidiabético de Ciudad de La Habana donde se utilizó para realizar miles de análisis.

En particular los polarímetros LASERPOL 101 y 101M se

incorporaron a la industria farmacéutica y jugaron, durante más de 20 años, un papel importante en el control de la producción de compuestos de dextrosa y otros en varias empresas del país.



Figura 3. Polarímetro automático y digital LASERPOL 101, introducido en la Planta de Sueros y Hemoderivados de Ciudad de La Habana, para el control de la producción de sueros de glucosa y otros productos, con el mismo se controlaba la producción de estos productos en el país.

A fines de la década del 80 el CEDEIC se comprometió en el diseño y construcción de un elipsómetro, con un láser de He-Ne para la industria microelectrónica. equipo permitiría la determinación de espesores de películas delgadas y constantes ópticas como índice de refracción y coeficiente de extinción de diversos materiales. El proyecto se desarrolló por un grupo multidisciplinario dirigido por el físico Rolando A. Díaz. Se logró construir un prototipo de elipsómetro automático con sistema electrónico comandado por un ordenador personal que controlaba el cambio de ángulo de incidencia del haz de luz, el posicionado de la muestra, el proceso de medición y la elaboración de los datos. El equipo se validó a partir de la comparación de los resultados obtenidos con elipsómetros de diversos laboratorios y se comenzó la fabricación de cuatro ejemplares que iban a ser comprados por la Unión Soviética, proceso que no concluyó debido a su desintegración a fines de los años 90.

#### VIII LA UNIÓN DEL CEDEIC Y EL CENTRO DE ESTUDIOS APLICADOS AL DESARROLLO NUCLEAR (CEADEN)

En el llamado "Periodo Especial" los trabajos del CEDEIC continuaron. Se obtuvieron resultados importantes en el desarrollo de equipos de fisioterapia y laser puntura de la serie LASERMED y FISSER y equipos analíticos tales como polarímetros automáticos de la serie LASERPOL y densitómetros automáticos. Los equipos producidos en el CEDEIC obtuvieron Medallas de Oro en las ferias internacionales "Salud para Todos" y en las Ferias internacionales de La Habana. Una patente del polarímetro obtuvo Medalla de Plata en Ginebra en el año 1996.

Por su parte, en el Centro de Estudios Aplicados al Desarrollo Nuclear (CEADEN) creado en 1985, se desarrollaba investigación básicas en Física Nuclear, Física del Estado Sólido y Óptica experimental, dirigiendo sus esfuerzos a la fabricación de equipos como detectores semiconductores, a cargo de la Dra. Angelina Díaz, láseres de nitrógeno bajo la dirección del físico Luis Baly y medidores de energía y potencia de láseres, entre otros.

En el año 2001 se unen el CEDEIC y el CEADEN manteniendo el nombre de este último. Así, el nuevo CEADEN amplía su línea de fabricación de equipos. El grupo intgerado por el M.C Pedro Larrea, la Dra. Margarita Cobas y los ingenieros Lorenzo Hernández, Sandra Fernández y Humberto Fernández, entre otros, diseñaron densitómetros, polarímetros y láseres para acupuntura o fisioterapia que se introdujeron en la industria y en los servicios de salud nacional y se exportaron a varios países de Latinoamérica.

Sin dudas los grupos del CEDEIC y después del CEADEN están entre los que mayor aportes han hecho en el campo de las aplicaciones de la óptica en Cuba.



Figura 4. Medidor de energía y potencia láser LM-09 desarrollado por el Prof. Titular Juan Darias y colaboradores.

Muestra del desarrollo alcanzado en este centro es la organización del evento científico internacional TECNOLASER que en 2016 celebrará su octava edición, en cuya organización se destaca el trabajo realizado por los M.C. Omar Morales y Justo Ravelo, entre otros.

Por último, no se puede hablar de los trabajos desarrollado en el CEDEIC y luego en el CEADEN, sin mencionar al M.C. Aurelio Oliva Viera, quien falleció de un ataque respiratorio en el año 2005. Licenciado en Física por la Universidad e la Habana en 1972 y Maestro en Ciencias en la especialidad de Óptica por el IPSJAE, Yeyo, muy querido y respetado en la comunidad de físicos cubanos, fue quien en 1993 contactó a la Comisión Internacional de Óptica (ICO) y creó el comité territorial cubano de esta organización, que presidió hasta 2001. Fue, además, jefe de la sección de Óptica de la Sociedad cubana de Física durante varios años.

## IX INSTITUTO DE METEOROLOGÍA DE CUBA

En el Instituto de Meteorología de Cuba, (INSMET) se creó un importante grupo de trabajo conocido por la Estación

LIDAR de Camagüey que toma su nombre a partir de la instalación de un radar de ese tipo en el año 1988 destinado a la investigación de la radiación solar y los aerosoles estratosféricos, es decir, las partículas, en estado sólido o líquido, en suspensión en la atmósfera. Este grupo de trabajo dirigido por el Dr. Juan Carlos Antuña es el único de su tipo en Cuba, tiene liderazgo en el área del Gran Caribe, y un reconocido prestigio internacional.

En el año 2007 se firmó un Acuerdo Marco para la colaboración entre el Instituto de Meteorología y el grupo de Óptica Atmosférica de la Universidad de Valladolid (UVAGOA), que permitió la instalación en Camagüey de un Fotómetro Solar, para medir las propiedades ópticas de los aerosoles, y un Impactador de partículas para medir el tamaño de aerosoles en superficie.

### X EL CENTRO DE NEUROCIENCIAS DE CUBA

En septiembre de 1993 en el Centro de Neurociencias de Cuba, un pequeño grupo de optoelectrónica dirigido por el Dr. Luis Martí comenzó a trabajar en el diseño de láseres para aplicaciones médicas. El grupo fue heredero del trabajo desarrollado dos décadas atrás en el IPSJAE. Construyeron dos dolorímetros láser con láser de  $CO_2-N_2$ -He (denominados Estimulas 1 y Estimulas 2) y un bisturí láser con láser de  $CO_2-N_2$ -He (LASERMED LQ 25) para la empresa TECE, S. A., que realizó más de 3000 operaciones quirúrgicas. Estos equipos se emplearon en el Centro de Investigaciones Médico-Quirúrgicas y en el Hospital Militar Carlos J. Finlay. La actividad de este grupo duró hasta diciembre de 2003. Luis Martí se trasladó al CEADEN donde continuó trabajando en aspectos teóricos y experimentales de la Óptica hasta su fallecimiento.

## XI CENTRO DE INMUNOENSAYO (CIE)

Este importante centro fue fundado en 1987 y consta de dos agrupaciones científico-productivas: Inmunoquímica e Instrumentación. Tuvo como antecedente los trabajos desarrollados al frente de un grupo multidisciplinario por el Dr. J. L. Fernández Yero en el Centro Nacional de Investigaciones Científicas de Cuba (CENIC).

Bajo la dirección del Dr. C Miguel Angel García se desarrollaron espectro-fotómetros y espectrofluorímetros incorporados en el Sistema Ultra-microanalítico (SUMA), creado en la década de 1980-1990 para el diagnóstico del hipotiroidismo congénito. Especialistas del centro crearon una red formada por de 167 laboratorios a nivel nacional, y cuatro empresas TECNOSUMA en el extranjero. Unos 10 países de América Latina utilizan esta tecnología cubana.

En el CIE se investigan nuevas tecnologías de diagnóstico, la obtención de reactivos, el desarrollo de instrumentos y equipos; diseño de software y se brinda asesoría técnica y entrenamiento a personal especializado. Desde su apertura ha realizado millones de análisis clínicos, contribuyendo de manera importante a los resultados obtenidos por el Sistema de Salud en Cuba.

#### XII EQUIPOS OFTALMOLÓGICOS DE ALTA TECNOLOGÍA

Mención aparte merece la contribución de los físicos cubanos al desarrollo de la "Operación Milagro": un programa cubano - venezolano de operaciones gratuitas de cataratas, glaucoma, estrabismo y otras enfermedades de la visión a personas de bajos recursos en países del Tercer Mundo, utilizando cirugía láser refractiva.

Entre 2004 y octubre de 2008 habían sido operadas 1.314.000 personas de 33 países de América Latina, África y Asia, y para 2014. A partir del año 2005 y bajo la dirección del Dr. C. Germán Muñiz Planas, un colectivo de profesores del departamento de Física del ISPJAE, con el apoyo de especialistas del CEADEN y otros centros organizó e impartió un diplomado en Optoelectrónica y Láser. De este programa egresaron entre los años 2005 y 2007, 175 ingenieros que tuvieron la responsabilidad, bajo la dirección de los profesores, del montaje, puesta en marcha, mantenimiento y reparación de los equipos instalados en los centros oftalmológicos creados en Cuba (10) y en el extranjero (49). Además se llevó a cabo la evaluación de los sistemas para su uso en condiciones tropicales, se preparó una monografía sobre equipos oftalmológicos y se diseñó e impartió un curso de postgrado a 1200 médicos oftalmólogos. Por su excelente preparación técnica y profesional, decenas de estos especialistas recibieron la certificación de las firmas fabricantes para instalar, mantener y reparar los láseres excìmeros de cirugía refractiva.

Los cursos fueron impartidos por los profesores del ISPJAE, Dr. German Muñiz, Dr. Alfredo Moreno, Dr. J. Llovera, Dra. Adriana Mavilio, Dra. Margarita Fernández, asi como por profesores e investigadores del CEADEN y el Instituto Superior de Tecnología y Ciencia Aplicada (INSTEC). Una parte de los cursos impartidos se integraron al programa de Maestría en Óptica del ISPJAE.

# XIII GRUPO DE TECNOLOGÍA LÁSER DEL IMRE EN LA UNIVERSIDAD DE LA HABANA

A partir del desarrollo alcanzado en las décadas de los 70 y 80 del siglo XX por las facultades de Física y Química de la Universidad de la Habana, se crea, en el año 1985, el Instituto de Materiales y Reactivos para la electrónica (IMRE) con el objetivo de impulsar el desarrollo de la industria electrónica en el país. En el nuevo instituto se crea el laboratorio de Tecnología Láser bajo la dirección de Guillermo de la Cruz Estenóz, al que se incorpora el entonces estudiante y actual jefe del laboratorio, Dr. Luis Ponce Vidal.

En 1985 en este laboratorio se fabrican los primeros láseres de rubí y Nd (neodimio) como medio activo respectivamente. En 1988 se construyó un sistema de grabado en base a un láser de YAG, con desplazamiento XY controlado por computadora. En 1992 se construye un prototipo de láser para cirugía ocular fotodisruptiva y otro para cirugía endoscópica con fibra óptica, ambos utilizando láser de Nd:YAG pulsado.

ALTA En el periodo de 1992 a 1994 se obtienen espejos dieléctricos multicapa por evaporación en alto vacío. Los sustratos se fabricaron en el Centro de Inmunoensayo y las multicapas de ZnS y MgF2 con espesor controlado de  $\lambda/4$  se obtuvieron en el IMRE. Se lograron fabricar espejos para láseres de aratas, Nd:YAG y HeNe de hasta 20 capas. También se desarrollaron visión cavidades reflectoras, tanto especulares (plata sobre vidrio) fundo, como difusoras, estas últimas en base a polvo cerámico insertado en cilindros de vidrio.

En 1995 el Dr. Luis Ponce Vidal organiza en la Universidad de la Habana el V Encuentro Latinoamericano en Óptica, láseres y sus Aplicaciones (OPTILAS).

Entre 1996 y 1999 el grupo utilizó láseres de Nd:YAG pulsados en la limpieza de obras de arte pertenecientes al patrimonio cultural cubano. La ventaja de esta técnica es que los pulsos, cortos y potentes, alcanzan la zona superior de los objetos, donde se encuentra concentrada la suciedad y la evaporan, sin afectar significativamente la pieza, evitando el uso de sustancias contaminantes.

En 1999 se desarrolla un sistema para la obtención de capas delgadas por láser con el que se obtienen capas de materiales como: Ni, CdTe, PbTe de hasta 5 nanómetros de espesor. En 2002 se desarrolló un equipo perforador de piel (lanceta) para la realización de análisis de sangre (en pequeñas cantidades) de manera indolora.

# XIV INSTITUTO SUPERIOR DE TECNOLOGÍA Y CIENCIA APLICADA (INSTEC)

En esta institución está actualmente en vías de consolidación bajo la dirección del Dr. Alfo Batista Leyva un pequeño grupo dedicado al estudio y modelado del ojo humano cuyos resultados tienen potencial aplicación en la esfera de la cirugía oftalmológica en el país.

# XV CONCLUSIONES

Se presentó un resumen de la investigación en óptica y el desarrollo de sus aplicaciones en Cuba donde se puede apreciar la madurez alcanzada en la década de 1980.

Además del fuerte impacto sufrido a partir de la caída del campo socialista y el efeto del bloqueo económico que sufre el país, es necesario decir que los resultados, sobre todo en los centros que no estaban vinculados a los llamados polos científicos, se vieron limitados también por la falta de autonomía en su gestión económica para adquirir los componentes e insumos y para comercializar los productos. Otro aspecto negativo ha sido el inadecuado sistema de remuneración de los trabajadores de la ciencia.

En la actualidad la investigación en física en Cuba adolece sobre todo de falta de financiamiento y de una política científica clara a nivel del país.

La crisis económica que comenzó a en los años 90 ha afectado especialmente a los científicos jóvenes que en gran medida salen a buscar mejores oportunidades en otros países, lo que pone en peligro lo logrado en la formación de recursos humanos en el campo de la física en el país en los pasados 50 años.

A pesar de ello, este recuento demuestra que, a lo largo de medio siglo, un país en desarrollo como Cuba ha sabido acumular méritos en el campo de la Óptica suficientes para saludar dignamente el Año Internacional de la Luz y las Tecnologías Basadas en la Luz.

Por último, los autores se disculpan por cualquier omisión involuntaria de algún grupo, persona u resultado en este trabajo.

### REFERENCIAS

- A Comprehensive Study of the Development of Physics in Cuba from 1959. Angelo Baracca, Víctor Fajer, Carlos Rodríguez Castellanos. The History of Physics in Cuba. Series: Boston Studies in the Philosophy and History of Science, Editors A. Baracca, J. Renn, H. Wendt, Springuer. 304, 133 (2015).
- [2] L. Hernández, O. Vigil, F. González. Physica Status Solidi (a) 36, 33 (1976).

- [3] E. Vigil, J. A. Rodríguez y R. Pérez Alvarez. Phys. Stat. Solidi (b) 90 409 (1978).
- [4] E. Vigil et al, Rev. Cubana Fís. 1 70 (1981).
- [5] P. Díaz, T. Prutskij, M. Sánchez. Rev. Cubana Fís. 6 39 (1986).
- [6] L. Martí, Comunicación privada, 2009.
- [7] J. Altshuler, Comunicación privada, 2010.
- [8] F. Palacios, J. Ricardo, D. Palacios, E. Gonçalves, J. Valin, R. De Souza. J. Optics Comm. 248, 41 (2005).
- [9] J. Ricardo, M. Muramatsu, F. Palácios, M. Gesualdi, J. L. Valin, M. Prieto and Marcio Lopez. Optics and Lasers in Eng. 51 949 (2013). http://www.iga.cu/historia.html
- [10] Reporte al Comité Ejecutivo de la Unión Astronómica Internacional y a la Presidencia de la Comisión 46 de la IAU sobre la astronomía en la República de Cuba. Grupo de Trabajo de la Comisión 46 para el Desarrollo de la Astronomía a Nivel Mundial (PGWWDA). 16 de Febrero de 2005.
- [11] Rolando A Díaz, Justo Ravelo, Pedro L Dorticós, Humberto Fernández, Jana Karakadze, Ricardo Neyra and Omar Morales. Proc. Int. Workshop on Optoelectronic Materials and their Applications, La Habana 1993. Edizioni ETS, Pisa.

# EL IV SLAFES: UNA MIRADA A 40 AÑOS DE DISTANCIA THE IV SLAFES: A GLANCE 40 YEARS AFTER

D. de J. Alamino Ortega<sup>†</sup>

Centro Universitario Municipal "Enrique Rodríguez-Loeches" Universidad de Matanzas; diego.alamio@umcc.cu<sup>+</sup> + autor para la correspondencia

#### Recibido 24/7/2015; Aceptado 15/10/2015

PACS: 01.65.+g History of science, 01.10.Fv Conferences, lectures, and institutes, 60 Condensed matter: structural, mechanical, and thermal properties

En 2015 se cumplen cuarenta años de haberse celebrado en Cuba el IV Simposio Latinoamericano de Física del Estado Sólido (SLAFES). Transcurría en aquél entonces el año 1975, y el XVII desde 1959, cuando la dirección del país decide impulsar la ciencia en Cuba. A la luz de la herencia dejada por Varela y Gran, y con la labor de entusiastas y capaces profesionales, la enseñanza de la física en Cuba fue transformada significativamente. Al amparo de la Ley de Reforma Universitaria de 1962, se crea la carrera de Licenciado en Física, que tiene sus primeros graduados a mediado de los 60, y se abre la senda a las investigaciones científicas; antes no se formaban propiamente físicos en Cuba ni estructuralmente existían investigaciones científicas en el campo de la física. Para el impulso de las investigaciones y también en la docencia, se contó con la altruista colaboración internacional, de la URSS, el campo socialista y de especialistas provenientes de Europa occidental y América, muchos de los cuales, colaboraron con Cuba por sus simpatías hacia el proyecto revolucionario [1],[2].

En ocasión de la celebración del IV SLFES, ya en Cuba había varias instituciones que trabajaban en el campo de la física: en prominente lugar, La Escuela de Física de la UH, las de las Universidades de Oriente y Las Villas, el Instituto de Meteorología de la Academia de Ciencias de Cuba, el Centro de Microelectrónica de la UH, algunas dependencias del CNIC, el Instituto de Investigaciones Nucleares, el Departamento de Ciencias Básicas de la CUJAE, el Instituto Pedagógico y el Instituto de Oncología y Radiobiología, entre otros [3].

El contexto internacional para el desarrollo de la reunión de los físicos latinoamericanos no resultaba muy favorable, Cuba había sido expulsada de la OEA en 1962 y solo quedó México manteniendo relaciones diplomáticas. En Chile un golpe de Estado en 1973 había acabado con la democracia; Uruguay, Argentina, Brasil, padecían situaciones similares. Para algunos de los participantes latinoamericanos resultaba una hazaña venir a Cuba, pero aún así, casi un centenar acudió a la cita. Los SLAFES habían comenzado a celebrarse en Caracas en 1969 y con periodicidad de dos años siguió Bariloche y Ciudad México, acordándose en esta urbe que el próximo fuera efectuado en Cuba. Este mérito lo alcanza

la Isla por el vertiginoso desarrollo experimentado en la Física del Estado Sólido (FES) en ¡prácticamente una década! El primer diodo cubano construido fue de germanio (por aleación) en el año 1968 [1], lo que posibilitó apropiarse de la tecnología; diodos y transistores de germanio por aleación se obtenían ya en 1969, a lo que siguió la confección de transistores, circuitos integrados y tetrodos MOS, transistores bipolares npn normales y epitaxiales y transistores MOS con compuerta de polisilicio y celdas solares [4]. Del mismo modo se iban obteniendo resultados en el desarrollo de aleaciones metálicas, el crecimiento de monocristales; y se conseguían capas delgadas, a la vez se implementaban procedimientos para la caracterización de los materiales y dispositivos. Concomitante con estos avances, se construía el equipamiento para dotar a los laboratorios de investigación y los físicos teóricos progresaban en explicar y predecir el comportamiento de los dispositivos. Cuba comenzaba a ser reconocida por poseer una masa crítica de especialistas con alta calificación, algunos de los cuales habían trabajado y estudiado en importantes centros de investigación de Europa y la URSS [2].

El IV Simposio fue celebrado en las Instalaciones de la Escuela de Física de la Universidad de la Habana y en el Hotel Habana Libre, del 27 de enero al 7 de febrero. Coincidiendo con el evento y con una duración de tres semanas, se efectuó un Curso de Dispositivos Semiconductores del 3 al 21 de febrero, ofrecido por especialistas de alto reconocimiento internacional, lo que hizo que La Habana, durante estos días, se convirtiera en la capital Latinoamericana de la FES. La realización del evento contó con el auspicio de la UNESCO, el PNUD, el Centro Latinoamericano de Física (CLAF) y con el apoyo de la UH y la Comisión Nacional Cubana de la UNESCO [5].

La inauguración tuvo lugar en el anfiteatro "Sanguily" de la UH, y es relevante que haya contado en la presidencia con personalidades como el Dr. Benito Pérez Maza, Vicepresidente del Consejo Nacional de la Ciencia y la Técnica y a su vez Viceministro de Educación y Ernesto Meléndez Vicepresidente de la Comisión Nacional de Colaboración Económica y Científico-Técnica. También estuvieron presidiendo el acto el Rector de la UH Hermes Herrera, quién hizo las palabras de apertura, el Decano de la Facultad de Ciencias Armando Pérez Perdomo, así como el Director de la Escuela de Física de la UH Pedro Díaz Arencibia. De los representantes extranjeros hizo uso de la palabra en la inauguración el Administrador Adjunto del PNUD para América Latina, Dr. Gabriel Valdés, el Jefe de la Misión de la UNESCO en Cuba, Dr. César Fernández Moreno; el Director del CLAF Dr. Roberto Bastos D'Acosta y el jefe de la División de Ciencias de la UNESCO Dr. Augusto Forti, quién trasmitió los mejores deseos del Director General de la UNESCO, Amadou Mathar M'Bow [5].

Al IV SLAFES asistieron 82 solidistas de México, Argentina, Venezuela, Ecuador, Brasil, Colombia, Costa Rica, Perú y Chile y se presentaron 55 trabajos, de ellos, 26 correspondieron a físicos cubanos [1]. La cifra total de participantes superó los doscientos, entre los cuales se encontraban estudiantes de la carrera de Física de la UH, que en su preparación como físicos, atendiendo al modelo de formación del profesional, a la vez que cursaban la carrera trabajaban en conjunto con sus profesores en las investigaciones.

El Simposio en esta edición fue convocado para tratar aspectos de actualidad de la metalurgia y la microelectrónica, en tres campos básicos: Magnetismo y sus aplicaciones, Transformaciones de fases y Procesos de aglutinamiento. Respondiendo a estas temáticas fueron desarrollados los cursos: "La descomposición espinodal (algunos aspectos teóricos y sus realidades)" a cargo del Prof. argentino Alberto Bonfiglioli; "Modelo Ondulatorio de transiciones de fase", del Prof. A. E. Cook, proveniente de la Universidad de IIllinois; "Compuestos III-V, sus propiedades, crecimiento y aplicación a los diodos emisores de luz", impartido por el Prof. A.R. Peaker, del Reino Unido; "Método de Stepanov. Posibilidades y utilización en la obtención de materiales semiconductores" del Prof. I.I. Koptiev del Instituto Físico-Técnico Ioffe de Leningrado; "Electrónica de metales de transición" que lo desarrolló el Prof. J.M. Ziman, de la Universidad de Bristol en Inglaterra; "Magnetismo en los Metales", del Prof. P. Lederer, proveniente de la Universidad de París, y "Ferromagnetismo, ferrimagnetismo y antiferromagnetismo en metales de Transición", a cargo del Prof. G.S. Krinchik de la Universidad Estatal de Moscú. Los materiales impresos con el contenido de los cursos se distribuyeron a los participantes.

El intercambio científico logrado en los días del evento fue una oportunidad única para muchos físicos cubanos, algo que antes no habían podido experimentar, por el estado de aislamiento en que se encontraba Cuba. El Simposio permitió ponerse en contacto con lo mejor que se hacía en la Física del Estado Sólido (FES) en América Latina, y asomarse al mundo; a la vez que brindó posibilidades de confrontar y establecer comparaciones en cuanto a la formación brindada en las universidades cubanas y valorar la pertinencia de la política científica nacional que se había inclinado hacia investigaciones adecuadas a las condiciones del país, que solventaran necesidades y aportaran a su progreso, siguiendo una vía de desarrollo soberano. Con atención a esta línea, ya casi era una realidad,

la fabricación a escala industrial, de dispositivos electrónicos y circuitos integrados, aprovechando la experiencia obtenida, los recursos del país y la colaboración internacional [6]. El resultado de la confrontación con colegas foráneos, dio cuenta que la formación del físico cubano no distaba de lo que se pretendía en otros países del área y se realizaba con el acceso a la más actualizada bibliografía. Para algunos de los visitantes resultó una sorpresa conocer que más de 300 físicos, mayoritariamente graduados en Cuba, trabajaban en investigaciones [5].

El intercambio, no solo se circunscribió al ámbito científico, los participantes del IV SLAFES pudieron disfrutar de una gala artística en la que se mostraron facetas de la cultura cubana, y para la que sirvió de escenario el portentoso frontis de la Facultad de Matemática y Computación; otras actividades de tipo social y cultural se efectuaron en el Habana Libre, incluyendo su Salón de Embajadores, así como los concurrentes pudieron apreciar la obra teatral Galileo Galilei, escenificada por el Grupo Teatro Estudio. Fue muy impresionante para los visitantes recorrer la Vocacional Lenin, por sus dimensiones y encargo social, lo que motivó al Dr. Bastos D'Acosta expresar que: "La Escuela Lenin me parece algo único en el mundo. Es temprano todavía para saber todo el impacto que va a tener sobre el futuro cultural del país [...] Algo como una segunda revolución dentro de la Revolución..." [5].

Clausuró el SLAFES el Dr. Benito Pérez Masa, quién destacó que el sistema educativo cubano, libre y gratuito, abrió oportunidades a todos; lo que unido a una acertada política científica nacional, ha permitido los logros que en el campo científico se mostraron en el evento.

## REFERENCIAS

- [1] D. de J., Alamino Primeros pasos de las Investigaciones en Física del Estado Sólido en Cuba, Revista Cubana de Física Vol.2, No 1, 2005, pp.81.
- [2] A. Baracca, V. Fajer, y C. Rodríguez, A Comprehensive Study of the Development of Physics in Cuba from 1959, en The History of Physics in Cuba, Boston Studies in the Philosophy and History of Sciences 304, pp 115.
- [3] Z. Marinello Discurso Clausura en el Primer Encuentro de Físicos Cubanos, Universidad de La Habana, 23 de febrero de 1974, en La Física en Cuba: Breve Recuento, Impresora Universitaria "André Voisin", Diciembre 1974, Habana, Cuba.
- [4] A. Cerdeira, et al, Realización de transistores MOS canal p, Ciencias, Serie 2, Física, No.18, Abril de 1973, Centro de Información Científica y Técnica de la Universidad de La Habana, pp. 3.
- [5] Boletín de la Comisión Nacional Cubana de la UNESCO, No.57, Año 14 Mayo-Junio 1975.
- [6] E. Vigil, Experimental Semiconductor Physics: The Will to Contribute to the Country's Economic Development, en The History of Physics in Cuba, Boston Studies in the Philosophy and History of Sciences 30, pp 289.

# CELEBRANDO EL CUADRÁGESIMO QUINTO ANIVERSARIO DE LA PRIMERA GRADUACIÓN DE FÍSICOS EN LA UNIVERSIDAD DE ORIENTE

CELEBRATING THE 45<sup>TH</sup> ANNIVERSARY OF THE FIRST GRADUATION OF PHYSICISTS AT UNIVERSIDAD DE ORIENTE

L. M. Méndez-Pérez<sup>†</sup>, P. Muné Bandera y E. J. Roca Oria

Dpto. de Física, Facultad de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad de Oriente; Imendez@uo.edu.cu<sup>+</sup> + autor para la correspondencia

Received 3/6/2015; Accepted 4/8/2015

En este artículo se revelan los rasgos principales del desarrollo de la Carrera de Física en la Universidad de Oriente desde su fundación 45 años atrás. Además, se muestran las principales ideas que motivaron su creación y como estas se mantienen vigentes en el proceder de la Carrera de Física en la actualidad.

In this paper the main features of the development of the Physics career at Universidad de Oriente since its foundation 45 years ago are revealed. In addition, the main ideas that motivated its creation and how they are present in the behavior of the Physics career nowdays are showed.

PACS: Palabras clave. 01.65.+g History of science, 01.85.+f Careers in physics and science, 01.75.+m Science and society

En la tarde del martes 8 de diciembre de 1970 en el emblemático e histórico Teatro Universitario de la Universidad de Oriente (UO) se celebró el acto solemne de graduación de los primeros 19 Ingenieros Físicos formados en esta indómita institución académica, cumpliéndose este año su XLV aniversario, en la figura 1 se muestra una foto de cuatro de aquellos graduados, que, 44 años después, asistían al XIII Simposio de la Sociedad Cubana de Física y a su XI Congreso (2014).

Con esta graduación se hacía realidad un sueño existente, casi desde la fundación de la Universidad, pues, en 1951, se redactó el proyecto de organización de la Escuela de Ciencias y de las Carreras de Ciencias Naturales y de Físico-Química de la. Facultad de Ciencias e Ingeniería, la que, para 1956, se transformó en la Facultad de Ciencias Naturales, que ofrecía, entre otras, las carreras de Física - Matemática y Química -Física.

Con la Reforma Universitaria del 10 de enero de 1962 se introduce en Cuba la formación de Licenciados en Física en la Universidad de La Habana, carrera que también se quiso abrir en la UO y, en el año 1965 [1], se constituyeron dos comisiones, dirigidas por los Ingenieros Luis Oliva y Miguel Matute, respectivamente, para analizar las vías de formar físicos en la UO, con el objetivo de resolver los problemas docentes de esta disciplina. Pero esta idea no prosperó porque se pensaba que la Universidad de La Habana podía formar a todos los físicos que necesitaba el país.

En 1967, a los veinte años de fundada la Universidad de Oriente, se inició nuevamente la gestión de la fundación de su Escuela de Física y, en intercambios realizados con el físico soviético F. D. Kochanov, que trabajaba en la Universidad de La Habana, se vislumbró [2] que el objetivo no se limitaba a resolver sólo el problema docente, sino también el de

desarrollar la Física y, fundamentalmente, sus aplicaciones en la industria minera y otras; así surge la idea de la formación de "Ingenieros Físicos" en la Facultad de Tecnología.



Figura 1. Cuatro de aquellos graduados...

Con estas premisas, en el propio año 1967 se solicita al Ministerio de Educación (MINED) la autorización para formar físicos en un Plan Especial de Ingeniería Física de la Escuela Básica de la Facultad de Tecnología; este fue el primer paso en la gestación de la Escuela de Física de la UO, siendo los objetivos del plan [3]:

> 1. el grupo de Física Aplicada persigue resolver en términos generales todas las necesidades docentes, de investigación o de cualquier otro tipo en el campo de la Física en la UO.

- 2. pretende la formación de un núcleo inicial en nuestra Universidad, que trabajará en diversas ramas de la Física Aplicada... los graduados de este grupo de Física Aplicada recibirán el Título de Ingenieros Físicos.
- 3. pretende la formación de un Físico, con buena base experimental y teórica, así como cierta formación técnica capaz de trabajar en las investigaciones aplicadas e industriales, así como incorporar los últimos adelantos de la Física a la Tecnología.

Como se observa de la letra y el espíritu de la cita anterior, se pretendía la formación de un Físico Industrial o Físico Técnico. Al oficializarse la Escuela de Física en marzo de 1970, se definió un perfil de trabajo, dentro de los métodos físicos de análisis, en los campos de Física Nuclear, Óptica y Espectroscopia y Física de los Rayos X y Metales.

En 1976, con el surgimiento del MES, desaparece oficialmente la Escuela de Física, pero no su espíritu. Hasta esta fecha [4] ya se habían graduado 40 físicos, algunos en Física Nuclear; la matrícula de la Escuela en ese curso era de unos 50 alumnos, repartidos en todos los años, y todos sus graduados ya presentaban tesis o trabajos de diploma como ejercicio de culminación de estudios. El aumento del nivel y del rigor científico - académico, que comenzó a introducirse en el año 1976 con el regreso de los integrantes del claustro con cursos de pos graduación en el extranjero, y el intercambio, básicamente con la RDA y la URSS, se intensifica y, para 1985, el claustro de treinta y cinco profesores contaba con ocho doctores (candidatos a doctores en ciencias, como se denominaban en ese tiempo) (22,9%), uno de ellos formado en la propia Escuela de Física y ya catorce tenían las categorías de profesores titulares o auxiliares (40,0 %).

Al comienzo de la década de los 80, hubo decisiones (como la creación del Departamento de Física para las Ciencias Técnicas, que, en 1985, pasa al Instituto Superior Politécnico Julio Antonio Mella en la propia ciudad de Santiago de Cuba; la eliminación de las especialidades de los planes de estudio desde 1982; el cierre de las investigaciones aplicadas de la Física Nuclear por decisión de la Secretaría Ejecutiva de Asuntos Nucleares (SEAN) entre 1985 y 1986) que propiciaron, al inicio, una débil emigración, pero que, con el tiempo, se fortaleció tomando parte el personal más calificado del claustro de la Escuela de Física. En cuestión de dos años emigraron unos diecisiete profesores, se redujo el número de doctores a cuatro y el de profesores titulares y auxiliares a cinco; por esta emigración, el claustro se comenzó a completar con personal recién graduado o de graduados con otra formación. Así, para 1993 el claustro se había renovado, prácticamente, en su totalidad.

Lo anterior trajo como consecuencia que la atmósfera científico - académica y la filosofía con la que había surgido la Escuela de Física menguaran, pero, con el esfuerzo realizado por los pocos que no emigraron, en compañía de algunos recién incorporados al claustro, se logró en el bienio 1986 -1987 cambiar las líneas de investigación iniciales. Algunos

de los que no emigraron, con la adquisición en 1987 de un microscopio electrónico, se incorporaron a entrenamientos para adquirir una nueva especialización relacionada con estas técnicas, básicamente en la esfera de las Ciencias de los Materiales. Otros se dedicaron a la automatización de experimentos como herramienta de trabajo y a la Física Computacional, las que se combinaron o aplicaron a los campos de la Biofísica, la Física Médica y la Biotecnología; a estos campos se vincularon otros métodos, como los de la RMN de un grupo de investigación creado en 1981. Con esto, se obtuvieron, en el cuatrienio 87-90 algunos resultados que definieron el camino a seguir. La fusión de los grupos de Física Médica y de RMN, con sus resultados, fue la base sobre la que se inauguró por Fidel Castro Ruz, Presidente del Consejo de Estado, el 10 de febrero de 1993, el actual Centro de Biofísica Médica con un edificio fabricado y equipado para el desarrollo científico y sus aplicaciones a la Biomedicina.

A partir de este mismo año, se establecen líneas de investigación diferentes a las existentes al fundarse la Escuela de Física en 1970: Fluorescencia y Aplicaciones del LASER, Física Teórica (apoyada por el Departamento de Física Teórica de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana), Ciencias de Materiales, Enseñanza de la Física en el nivel universitario, y un grupo dedicado a las investigaciones en Fluido-dinámica Computacional.

El claustro de la carrera de Licenciatura en Física, ya en el 2005, tenía el 80% de profesores titulares y auxiliares, el 60% de doctores y, del resto, el 66,6% tenía una maestría en ciencias. Había un promedio de cinco artículos publicados por profesor. Estos indicadores fueron determinantes para que, en ese año, la carrera de Licenciatura en Física fuera acreditada de excelencia. Estos logros se mantienen y, en el año 2010, en el informe de evaluación externa de la carrera [5], se plantea: "Se aprecia en el claustro gran sentido de pertenencia, vocación docente, capacidad de entrega a la búsqueda de soluciones a los problemas que pudieran afectar el proceso docente educativo, elevada experiencia profesional que se corresponde con la alta categoría docente y la formación científica. El 46,7 % posee grado de doctor y el 62,5 % de máster del resto del claustro. El 56,7 % tiene la categoría docente de profesor titular o profesor auxiliar".

En el quinquenio 2005/2010, hay un promedio de 4,3 publicaciones por profesor y se obtienen resultados relevantes, destacándose: dos patentes y siete registros, cuatro premios de la ACC (dos nacionales y dos provinciales) y dos premios nacionales de la salud, además de un artículo científico dentro de los 20 más destacados en 2007 en el Instituto Americano de Física Internacional, otorgado por el Parlamento Europeo.

Estos indicadores fueron también determinantes para que, en el año 2010, la carrera de Licenciatura en Física fuera re acreditada de excelencia.

En el año 2015 el claustro mantiene su calidad, con un 46,42% de doctores, 66,6% de máster y un 75,0% de profesores titulares y auxiliares; se tiene un índice de publicaciones por profesor de 4,42 y, de ellas, 2,21 corresponden a los grupos 1 y 2. Durante el periodo, se han obtenido resultados relevantes; entre ellos se destacan seis premios de la ACC (tres nacionales

#### y tres provinciales).

En los últimos cinco cursos se observa que un elevado por ciento de los trabajos de diploma defendidos están dentro del campo de la Física Aplicada; de ellos, el 55 % se enmarca en la Ciencias de los Materiales, el 30% en Biofísica Médica y el resto en temas fundamentales de la Física. En la figura 2 se muestra a una estudiante en su defensa de trabajo de diploma en el reciente curso 2014 – 2015.



Figura 2. Defensa de trabajo de diploma, curso 2014-2015.

Una ilustración de lo anterior son los siguientes trabajos de diploma:

"Visualización tridimensional de la densidad de corriente eléctrica en el tumor y su tejido sano circundante generada por un arreglo de electrodos. Solución analítica." (Autor: Javier González Joa; tutores: Lic. Ana Elisa Bergues P. y Dr. C. Luis Bergues C. Julio 2010). "Caracterización de la anisotropía y de la conductividad efectiva de superconductores granulares de alta temperatura crítica en el estado normal." (Autor: Francisco Martínez Sánchez; tutor: Dr. C. Pedro Muné B. Julio 2014).

Como se observa, la letra y el espíritu de los objetivos citados antes del plan inicial de formación de los primeros ingenieros físicos en la Universidad de Oriente [3] se mantienen en la actualidad, 45 años después, vivos, cuando ya, hasta el año 2014 [4], se tienen 466 egresados, de ellos quince extranjeros de países de África, América Latina y el Caribe.

Al respecto, en [6] se hace la siguiente valoración: "Fuimos testigos del compromiso y la entrega de ese pequeño colectivo, muy unido, de unos ochenta profesores y estudiantes, que han sabido sobreponerse a todas las adversidades para mantener la carrera en un buen nivel y con un buen impacto en su entorno. Nos impresionó muy positivamente el alto por ciento de trabajos de

# curso y de diploma experimentales, en áreas como biofísica, óptica, superconductividad y magnetismo".

En los años iniciales de la carrera, no faltaron detractores de la idea de formar físicos en la Universidad de Oriente; hubo que explicar y defender muchas veces la concepción de la formación de un físico capaz de desenvolverse en una matriz de profesionales no físicos y que este profesional tendría, necesariamente, que realizarse dentro de un contexto y servir para enlazar la Física con otras ramas. Se defendió la idea del "gato físico", aquel que, donde quiera, caía parado.

Esa concepción, 45 años después, se mantiene vigente. De esta forma, la carrera de Licenciatura en Física de la Universidad de Oriente ha devenido, en su decursar histórico, en un pilar para la formación de muchas generaciones de físicos en las provincias orientales del país, para la enseñanza, divulgación y aplicaciones de la Física en las mismas.

Afortunadamente, el futuro inmediato de la aplicación de tal concepción en la formación de físicos en la región oriental de Cuba está siendo ampliamente apoyada en infraestructura y formación de recursos humanos por el programa "La Universidad de Oriente promueve el desarrollo sostenible de la región Oriental de Cuba", resultado de la colaboración institucional entre la Universidad de Oriente y el Consejo Interuniversitario Flamenco de Bélgica. Este programa incentiva la formación de pos y pregrado en diferentes áreas del conocimiento mediante cinco proyectos de investigación y tres proyectos transversales. Temas como energías renovables, equipos médicos, ciencias básicas para la innovación y otros favorecerán la inserción de estudiantes de la carrera de Física en tareas de investigación multidisciplinares y, con ello, la continuidad de la formación, siguiendo la misma idea con la que fue concebida la carrera desde sus inicios.

## REFERENCIAS

- [1] Entrevista al Dr. Miguel A. Matute Peña en el año 1998.
- [2] Plan para la formación de físicos en la Universidad de Oriente (documento sin fecha exacta, probablemente escrito a fines de 1967 o inicios de 1968).
- [3] González J., Fuentes H. 1968. "Ponencia al Encuentro de Graduados", Universidad de Oriente.
- [4] Registro de graduados de Licenciatura en Física. Secretaría General de la Universidad de Oriente.
- [5] Informe sobre el proceso de evaluación y re acreditación de la carrera de Licenciatura en Física. Universidad de Oriente, Facultad de Ciencias Naturales. 29 de mayo de 2010.
- [6] www.física.uh.cu/acreditacióndefisicauniversidaddeoriente Visitado el 30 de octubre de 2015.

# NEUTRINOS: MYSTERIOUS PARTICLES WITH FASCINATING FEATURES, WHICH LED TO THE PHYSICS NOBEL PRIZE 2015 NEUTRINOS: PARTÍCULAS MISTERIOSAS CON CARACTERÍSTICAS FASCINANTES QUE LLEVARON AL PREMIO NOBEL DE FÍSICA 2015

#### Alexis Aguilar-Arévalo y Wolfgang Bietenholz<sup>†</sup>

Instituto de Ciencias Nucleares Universidad Nacional Autónoma de México, A.P. 70-543, C.P. 04510 Distrito Federal, México; wolbi@nucleares.unam.mx<sup>+</sup> + corresponding author

#### Recibido 10/11/2015; Aceptado 30/11/2015

The most abundant particles in the Universe are photons and neutrinos. Both types of particles are whirling around everywhere, since the early Universe. Hence the neutrinos are all around us, and permanently pass through our planet and our bodies, but we do not notice: they are extremely elusive. They were suggested as a theoretical hypothesis in 1930, and discovered experimentally in 1956. Ever since their properties keep on surprising us; for instance, they are key players in the violation of parity symmetry. In the Standard Model of particle physics they appear in three types, known as "flavors", and since 1998/9 we know that they keep on transmuting among these flavors. This "neutrino oscillation" implies that they are massive, contrary to the previous picture, with far-reaching consequences. This discovery was awarded the Physics Nobel Prize 2015.

Las partículas más abundantes en el Universo son los fotones y los neutrinos. Ambos tipos de partículas revolotean por todas partes, desde el Universo temprano. Esto es, los neutrinos están a todo nuestro derredor, y permanentemente pasan a través de nuestro planeta y nuestros cuerpos, pero no nos damos cuenta: son extremadamente elusivos. Fueron sugeridos como una hipótesis teórica en 1930, y descubiertos experimentalmente en 1956. Desde entonces sus propiedades continúan sorprendiéndonos; por ejemplo, son los principales actores en la violación de la simetría de paridad. En el Modelo Estándar de física de partículas aparecen en tres tipos, conocidos como "sabores", y desde 1998/9 sabemos que continuamente transmutan entre estos sabores. Esta "oscilación de neutrinos" implica que son masivos, contrario a la imagen previa, con consecuencias de largo alcance. Este descubrimiento fue distinguido con el Premio Nobel de Física 2015.

PACS: 01.65.+g History of science 14.60.Lm, 14.60.St Leptons, neutrinos 01.75.+m Science and society

#### I. A DESPERATE REMEDY

ETH Zürich, the Swiss Federal Institute of Technology, has a long tradition of excellence in physics and other sciences. In addition, it has a tradition (dating back to 19th century) to celebrate each year a large dance event, the Polyball. This also happened in 1930, when Wolfgang Pauli, one of the most renowned theoretical physicists, was working at ETH. The Polyball prevented him from attending a workshop in Tübingen (Germany), where leading scientists met to discuss aspects of radioactivity. Instead Pauli sent a letter to the participants, whom he addressed as "Liebe Radiaktive Damen und Herren" ("Dear Radioactive Ladies and Gentlemen"). This letter of one page was of groundbreaking importance: it was the first document where a new type of particle was suggested, which we now denote as the *neutrino*.

Pauli was referring to the energy spectrum of electrons emitted in the  $\beta$ -decay: from a modern perspective (not known in 1930), a neutron is transformed into a slightly lighter proton, emitting an electron. This  $\beta$ -*radiation* was observed, but the puzzling point was the following: there is some energy reduction in a nucleus where this decay happens, and if we subtract the electron mass, we should obtain the electron's kinetic energy, which ought to be the same for all electrons emitted. In fact, the  $\alpha$ - and  $\gamma$ -radiation spectra do exhibit such a sharp peak. For the  $\beta$ -radiation,

however, one observed instead a broad spectrum of electron energies, with a maximum at this value. In particular, in 1927 C.D. Ellis and W.A. Wooster had studied the decay  $^{210}_{83}$ Bi  $\rightarrow ^{210}_{84}$ Po and identified a maximal electron energy of 1050 keV, but a mean value of only 390 keV.



Figure 1. On the left: Wolfgang Pauli (1900-1958), Austrian physicist working in Zürich, Switzerland. On the right: the energy spectrum of the electron, which is emitted in the  $\beta$ -decay; the observation does not match the original expectation of a sharp peak. Pauli solved this puzzle by postulating the emission of an additional particle, which was hypothetical at that time.

This seemed confusing indeed, and prominent people like Niels Bohr even considered giving up the law of energy conservation. Pauli, however, made an effort to save it: as a "desperate remedy" he postulated that yet another particle could be emitted in this decay, which would carry away the energy, which seemed to be missing. He estimated its mass to be of the same order as the electron mass. He also knew that some nuclei change their spin by 1 unit under  $\beta$ -decay, so he specified that this new particle should carry spin 1/2, just like the electron; thus also angular momentum conservation is saved. To further conserve the electric charge, it must be electrically neutral, therefore he wanted to call it a "neutron". That would explain why this particle had not been observed, thus completing a hypothetical but consistent picture.<sup>1</sup>

#### II. FERMI'S THEORY

Two years later, James Chadwick discovered the far more massive particle, which we now call the neutron. In 1933/4 Enrico Fermi, who was working in Rome, elaborated a theory for the interaction of Pauli's elusive particle. He introduced the name "neutrino",<sup>2</sup> and suggested that it might be *massless*.



Figure 2. On the left: Enrico Fermi (1901-1954), famous for his achievements both in theoretical and experimental physics. On the right: scheme of the  $\beta$ -decay, which transforms a neutron into a proton, while emitting an electron and an anti-neutrino.

In our modern terminology, the emitted particle is actually an *anti-neutrino*,  $\bar{\nu}$ . This  $\bar{\nu}$ -emission is, in some sense, equivalent to an incoming neutrino,  $\nu$ , so the  $\beta$ -decay can be written in its usual scheme, or as a related variant,

$$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}$$
 or  $n + \nu \rightarrow p + e^-$ .

Referring to the latter scheme, Fermi made an ansatz for the transition amplitude M, where the wave functions of all four fermions interact in one space-time point x (to be integrated over),

$$M(x) = G_{\rm F} \left( \bar{\Psi}_{\rm p}(x) \Gamma \Psi_{\rm n}(x) \right) \left( \bar{\Psi}_{\rm e}(x) \Gamma' \Psi_{\nu}(x) \right),$$

$$G_{\rm F} \simeq 1.2 \cdot 10^{-5} \frac{(\hbar c)^3}{\,{\rm GeV}^2} \,. \tag{1}$$

This 4-*fermi term* describes the simultaneous transformations  $n \rightarrow p$  and  $\nu \rightarrow e^-$ , with factors  $G_F$  (Fermi's constant),<sup>3</sup> and  $\Gamma$ ,  $\Gamma'$  (to be addressed below). In Heisenberg's formalism, these are just transitions between the two isospin states of the same particle.<sup>4</sup>

This process is a prototype for the *weak interaction*, which is nowadays described by the exchange of *W*- and *Z*-bosons

(Fermi's constant can be expressed as  $G_F = g^2/(2^{5/2}M_W)$ , where *g* is the weak coupling constant and  $M_W$  the *W*-mass). Fermi's simple theory works well up to moderate energy. The refined picture — with an intermediate *W*-boson instead of the 4-fermi interaction in one point — prevents a divergent cross-section at high energy.

#### III. NEUTRINOS EXIST!

Pauli is often quoted as saying "I have done a terrible thing, I have postulated a particle that cannot be detected" (although it is not clear where this statement is really documented). In any case, it turned out to be wrong: in 1956 Clyde Cowan and Frederick Reines observed that anti-neutrinos, produced in a nuclear reactor in South Carolina, did occasionally interact with protons, which leads to a neutron and a positron (the positively charged anti-particle of an electron),  $p+\bar{\nu} \rightarrow n+e^+$ . This is an *inverse*  $\beta$ -*decay*, which they observed in two large water tanks.<sup>5</sup> They sent a telegram to Pauli, informing him that his particle really exists!



Figure 3. On the left: Fred Reines (left) and Clyde Cowan (right), the pioneers who first succeeded in detecting anti-neutrinos. On the right: diagrams of a  $\beta$ -decay variant (compatible with Fermi's formula (1)), and of the inverse  $\beta$ -decay (observed by Reines and Cowan in 1956).

#### *III.1. ... and they are all around!*

Of course, neutrinos had existed long before, since the Big Bang: just 2 seconds later they decoupled and ever since they are flying around all over the Universe. This is the *Cosmic Neutrino Background*, CvB. It has gradually cooled down, from  $\approx 10^{10}$  K to its temperature today of 1.95 K. It can be compared to the (better known) Cosmic Microwave Background, which was formed about 380 000 years later by photons, and which is somewhat warmer, 2.73 K.

In contrast to the Cosmic Microwave Background, which is being monitored intensively, the CvB has not been observed directly — neutrino detection is very difficult in general, and at such low energies it seems hardly possible. Still, the arguments for its existence are compelling and generally accepted. New indirect evidence has been provided in 2015 by Planck satellite data for details of the temperature fluctuations in the Cosmic Microwave Background. A *direct* detection of the CvB, however, is still a long-term challenge. The density throughout the Universe is about 336 neutrinos

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Hence Pauli had suggested one new particle, for truly compelling reasons like the conservation of energy and angular momentum. This can be contrasted with the modern literature, where a plethora of hypothetical particles are suggested, often based on rather weak arguments.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Since "neutrino" is a diminutive in Italian, its plural should actually be "neutrini", but we adopt here the commonly used plural.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>It is remarkable that Fermi already estimated its magnitude correctly, his value was  $G_F = 0.3 \cdot 10^{-5} (\hbar c)^3 / \text{GeV}^2$ .

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>The nucleons, *i.e.* the proton and the neutron, were assumed to be elementary particles at that time.

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup>Even today, reactor neutrinos are still detected with a variant of the technique employed by Cowan, Reines, and collaborators.

(and 411 photons) per cm<sup>3</sup>; in our galaxy it might be larger due to gravitational effects.

Neutrinos of higher energies are generated in stars — like the Sun — by nuclear fusion, in Active Galactic Nuclei, Gamma Ray Bursts, supernova explosions, etc. They are also produced inside the Earth (by decays), in our atmosphere (when cosmic rays hit it and trigger an air shower of secondary particles), and on the Earth, in particular in nuclear reactors. The latter provide  $\bar{\nu}$ -energies around 1 MeV, with a typical cross section of about  $10^{-44}$  cm<sup>2</sup>. The probability of an interaction in a solid detector of 1 m length is of order  $10^{-18}$ , so their chance of scattering while crossing the Earth is around  $10^{-11}$ .

This shows why it took a while to discover them; the search for neutrinos is sometimes described as "ghost hunting". For instance, in our daily life we never feel that we are exposed to a neutrino flux originating from the Sun, although some  $6 \cdot 10^{14}$  solar neutrinos cross our body every second. If we could instal a detector that fills all the space between the Sun and the Earth, it would capture only 1 out of 10 million neutrinos. In Section 7 we will come back to the solar and atmospheric neutrinos; this is what the 2015 Nobel Prize experiments were about.

#### IV. PARITY VIOLATION: A STUNNING SURPRISE

#### IV.1. Theory

A parity transformation, P, is simply a sign change of the spatial coordinates, P:  $x = (t, \vec{r}) \rightarrow (t, -\vec{r})$ . For a long time, people assumed it to a basic principle that the Laws of Nature are parity invariant. This seems obvious by common sense, and in fact it holds for gravity, electromagnetic and strong interactions. How about the weak interaction? The neutrinos are the only particles that only interact weakly (if we neglect gravity), so it is promising to focus on them to investigate this question.

At this point, we come back to the factors  $\Gamma$  and  $\Gamma'$  between the fermionic 4-component Dirac spinors  $\bar{\Psi}$ ,  $\Psi$  in eq. (1). They characterize the structure of the weak interaction, which arranges for these particle transformations. *A priori* one could imagine any Dirac structure: scalar, pseudo-scalar, vector, pseudo-vector or tensor ( $\mathbb{1}$ ,  $\gamma_5$ ,  $\gamma^{\mu}$ ,  $\gamma^{\mu}\gamma_5$ ,  $\sigma^{\mu\nu}$ ). Under a parity transformation, the "pseudo"-quantities (which involve a factor  $\gamma_5$ ) change sign, whereas the rest remains invariant.

If  $\Gamma$  and  $\Gamma'$  were both parity even, or both parity odd, then also this weak interaction process would be parity symmetric. However, in 1956 Tsung-Dao Lee and Chen-Ning Yang suggested that this might not be the case. Their scenario is reflected by a mixed structure of the form

$$M(x) = \frac{G_{\rm F}}{\sqrt{2}} \left( \bar{\Psi}_{\rm p}(x) \gamma^{\mu} (1 - \frac{g_{\rm A}}{g_{\rm V}} \gamma_5) \Psi_{\rm n}(x) \right)$$

$$\times \left( \bar{\Psi}_{\rm e}(x) \gamma_{\mu} (1 - \gamma_5) \Psi_{\nu}(x) \right),$$
(2)

where the vector terms — which Fermi had in mind — are parity even, while the axial vector terms are parity odd. The ratio  $g_A/g_V$  is a constant; its value is now determined as  $\approx 1.26$ . Hence vector and axial vector currents are strongly mixed, which breaks P invariance. But how was the violation of parity symmetry verified?

#### IV.2. Experiment



Figure 4. On the left: Chien-Shiung Wu (1912-1997), leader of the experiment that demonstrated the violation of parity invariance in 1957. On the right: the concept of her experiment, as described in the text.

In fact, it was confirmed only one year after Lee and Yang's suggestion in an experiment, which was led by another brilliant Chinese researcher, Chien-Shiung Wu. Her experiment dealt with the  $\beta$ -decay, which transforms a cobalt nucleus into nickel,

$${}^{60}_{27}\text{Co} \rightarrow {}^{60}_{28}\text{Ni}^* + e^- + \bar{\nu}$$
,

a process, which lowers the nuclear spin from  $J = 5 \rightarrow 4$ . A magnetic moment is attached to the nuclear spin, hence a strong magnetic field can align the spins in a set of Co nuclei. (This was not easy in practice: only after cooling the sample down to 0.003 K, a polarization of 60 % could be attained.)

How can the nuclear spin change be compensated by the leptons, *i.e.* by the electron  $e^-$  and the anti-neutrino  $\bar{\nu}$ ? They are both spin-1/2 particles, as Pauli had predicted, and they could be right-handed (spin in the direction of motion) or left-handed (spin opposite to the direction of motion).<sup>6</sup> Clearly, the compensation requires a right-handed particle flying away in the direction of the nuclear spin  $\vec{J}$ , and a left-handed one being emitted in the opposite direction.

The electrons are much easier to detect, and one observed their preference in the  $-\vec{J}$  direction. Under a parity transformation, the spin  $\vec{J}$  behaves like an angular momentum  $\vec{L} = \vec{p} \times \vec{r}$ ; it remains invariant. The direction of flight of the leptons, however, is exchanged. Hence this dominance of electrons in one direction demonstrates the violation of parity invariance. The reason is that the

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup>Strictly speaking this is the helicity, which coincides with the handedness, or chirality, in the relativistic limit; we are a bit sloppy about this distinction.

anti-neutrino only occurs right-handed (and the neutrino only left-handed),<sup>7</sup> so the  $\bar{\nu}$  has to move in the  $\vec{l}$ -direction.

This came a great surprise, *Nature does distinguish between left and right!* An example for the consternation that this result caused is Pauli's first reaction, who exclaimed "This is total nonsense!". It is a striking example for the fascinating features of the neutrinos. This sequence of surprises is still going on, and it embraces the 2015 Nobel Prize. Long before, in 1957 Lee and Yang received the Nobel Prize for their discovery; unfortunately Wu was left out.

As a *Gedankenexperiment*, one could also perform a C transformation ("charge conjugation"), which transforms all particles into their anti-particles and vice versa, thus flipping the signs of all charges. This shows that the Wu experiment also demonstrated the violation of C symmetry, but invariance is recovered under the combined transformation CP. In particular for the *chirality* (handedness) of  $\nu$  and  $\bar{\nu}$ , CP invariance holds. Lev Landau suggested that this might be a true symmetry of Nature.

In 1964, however an experiment directed by James Cronin and Val Fitch demonstrated that — in even more subtle decays, also due to the weak interaction — CP symmetry is violated as well. Now we are left with the CPT Theorem:<sup>8</sup> if we still add a simultaneous T transformation (a flip of the direction of time), then invariance must hold, if our world is described by a relativistic and local quantum field theory — that seems to be the case, so far a huge number of high precision experiments support it.

#### V. NEUTRINOS OCCUR IN DISTINCT FLAVORS

What distinguishes a neutrino from an anti-neutrino? We have mentioned the different chirality. In the Standard Model — to be addressed below — left-handed neutrinos  $v_L$  (right-handed anti-neutrinos  $\bar{v}_R$ ) occur, and they carry a weak hypercharge Y(-Y), which characterizes their coupling to a W or Z gauge boson (like the electric charge of other particles represents the coupling to a photon). Thus also the sign of Y distinguishes v from  $\bar{v}$ . However, their distinction was introduced much earlier, even before either of them had been detected.

In 1953, E.J. Konopinski and H.M. Mahmoud studied the decays involving the light particles that we call leptons. At that time, they knew the electron, the neutrino (as a hypothesis) and the muon,  $\mu^-$ , which had been discovered in 1936. The latter is similar to an electron, but 207 times heavier. Konopinski and Mahmoud introduced a new quantum number: they assigned to the particles v,  $e^-$ ,  $\mu^-$  the *lepton number* L = 1, their anti-particles  $\bar{v}$ ,  $e^+$ ,  $\mu^+$  have L = -1, and all the (non-leptonic) rest has L = 0.

The role of the lepton number should simply be its should

conservation, which holds indeed *e.g.* in the  $\beta$ -decay, or inverse  $\beta$ -decay, or in decays of charge pions,

$$\pi^- \to \mu^- + \bar{\nu} , \quad \pi^+ \to \mu^+ + \nu ,$$
 (3)

but it rules out a process like  $n + \bar{\nu} \rightarrow p + e^-$ , which is not observed.

This rule is still incomplete, however, since it allows for a decay like  $\mu^- \rightarrow e^- + \gamma$  ( $\gamma$  represents a photon), which is not observed either.

This led to the insight that leptons occur in distinct *generations*, with their own lepton numbers, like the electron number  $L_e = \pm 1$  for  $e^{\mp}$ , and the muon number  $L_{\mu} = \pm 1$  for  $\mu^{\mp}$ . This suggested that there are also distinct neutrinos, as Bruno Pontecorvo — an Italian physicist who had emigrated to the Soviet Union — pointed out in 1960: an electron-neutrino  $v_e$  with  $L_e = 1$  and a muon-neutrino  $v_{\mu}$  with  $L_{\mu} = 1$  (while  $\bar{v}_e, \bar{v}_{\mu}$  have  $L_e = -1$  and  $L_{\mu} = -1$ , respectively, and the rest is zero). The stronger assumption that  $L_e$  and  $L_{\mu}$  are *separately conserved* explains observed decays such as

$$\mu^{-} \to e^{-} + \nu_{\mu} + \bar{\nu}_{e} , \quad \mu^{+} \to e^{+} + \bar{\nu}_{\mu} + \nu_{e} ,$$
 (4)

which takes  $2.2 \cdot 10^{-6}$  s. It also distinguishes transitions like

$$n + \nu_e \rightarrow p + e^-$$
,  $n + \nu_\mu \rightarrow p + \mu^-$ , (5)

which require an intermediate charged boson  $W^{\pm}$ . These transitions do not occur if we exchange  $v_e$  and  $v_{\mu}$ , or replace them by anti-neutrinos. This distinction enabled the experimental discovery of  $v_{\mu}$  in 1962, by Lederman, Schwartz and Steinberger. Now we can write the inverse  $\beta$ -decay, observed by Cowan and Reines, in a more precise form:  $p + \bar{v}_e \rightarrow n + e^+$ .

	Fermion generations		
	1	2	3
leptons	$\begin{pmatrix} v_e \\ e^- \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \nu_{\mu} \\ \mu^{-} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} v_{\tau} \\ \tau \end{pmatrix}$
quarks	$\begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} c \\ s \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} t \\ b \end{pmatrix}$

Figure 5. Table of the fermions in the Standard Model.

The *Standard Model of particle physics* takes into account that later (in 1975) yet another cousin of the electron was found, the tauon  $\tau$ , which is 3477 times heavier than the electron (hence its life time is only  $2.9 \cdot 10^{-13}$  s). It is also accompanied by its own type of neutrino,  $v_{\tau}$ , so we are actually dealing with *three* distinct lepton numbers,  $L_e$ ,  $L_\mu$  and  $L_{\tau}$ .

Similarly the Standard Model incorporates three generations of quarks, so its fermionic content can be summarized as shown in Table 5.

<sup>&</sup>lt;sup>7</sup> This can be seen from eq. (2), which includes a projection of  $\Psi_{\nu}$  to its left-handed component,  $\psi_{\nu;L} = \frac{1}{2}(1 - \gamma_5)\Psi_{\nu}$ , but no right-handed component  $\psi_{\nu;R} = \frac{1}{2}(1 + \gamma_5)\Psi_{\nu}$  is involved. In fact, a right-handed neutrino, or a left-handed anti-neutrino, has never been observed. We will comment on their possible existence in the appendix.

<sup>&</sup>lt;sup>8</sup>A rigorous proof for this theorem was given in 1957 by Res Jost, previously Pauli's assistant. It is one of the most important and elegant results in Quantum Field Theory, but it is not easily accessible: Jost wrote his paper in German and published it in the Swiss journal Helvetica Physica Acta, which does not exist anymore.

In addition, the Standard Model involves gauge bosons (photons for the electromagnetic interaction, W and Z for the weak interaction, and 8 gluons for the strong interaction), plus the (scalar) Higgs particle. This is what all known matter in the Universe consists of.<sup>9</sup>

From a conceptual point of view, the Standard Model is only consistent for entire *fermion generations*, composed of a lepton doublet and a quark doublet (otherwise quantum effects break gauge invariance). On the other hand, there is no theoretical constraint on the number of generations. The higher generations involve heavier fermions, so they were discovered later. Hence one could wonder if this sequence is going on, and further generations will be discovered step by step.

This cannot be rigorously excluded, but there are good reasons to assume that there are not more than these 3 generations. The *Z*-boson is one of the heaviest elementary particles that we know, with a mass of 91 GeV, and it can decay into a neutrino–anti-neutrino pair of the same flavor,

$$Z \rightarrow v_x + \bar{v}_x$$
,  $x \in \{e, \mu, \tau\}$ .

It can also decay into  $e^- + e^+$ ,  $\mu^- + \mu^+$  or  $\tau^- + \tau^+$ , or into a quark–anti-quark pair. If we sum up all these decay channels (which were measured very precisely in the Large Electron-Positron Collider at CERN), we obtain — to a good precision — the full decay rate of the *Z*-boson. This is an argument against a 4th generation: if the *Z*-boson could decay into yet another  $\nu - \bar{\nu}$  pair, we should have noticed the missing part in this sum of decay channels.<sup>10</sup>

#### VI. THE MIXING OF QUARK AND OF LEPTON FLAVORS

#### VI.1. A look at the quark sector

We follow the historical evolution and first discuss mixing in the quark sector: we saw that the quarks occur in 6 *flavors*, such as the "strange" *s* quark. Also here quantum numbers were introduced, which indicate the quark contents of a specific flavor. For instance, the *strangeness* of a hadron<sup>11</sup> counts the number of its  $\bar{s}$  minus *s* valence quarks.

As a general trend, also the quarks can easily be transformed within one generation; that is analogous to the conservation of the generation specific lepton numbers. This encompasses for instance the  $\beta$ -decay,  $n \sim (udd) \rightarrow p \sim (uud)$ + leptons.

However, transformations between different generations happen as well: for instance, the strangeness of a hadron changes when an *s* quark decays into the much lighter quarks *u* and *d*. An examples is the decay of the baryon  $\Lambda^0$  into a nucleon and a pion,

$$\Lambda^0 \to p + \pi^- \quad \text{or} \quad \Lambda^0 \to n + \pi^0$$
$$(uds) \to (uud) + (\bar{u}d) \qquad (uds) \to (udd) + (\bar{u}u - \bar{d}d)/\sqrt{2}$$

(the lower line indicates the valence quark contents of the hadrons involved). Based on the heavy  $\Lambda^0$ -mass of 1.1 GeV, one could expect this decay to happen within  $\approx 10^{-23}$  s, but since it proceeds only by the weak interaction it takes as long as  $2.6\cdot 10^{-10}$  s.

The evolution is driven by the Hamiltonian, and from examples like these strangeness changing decays we can infer that the upper, or the lower, doublet partners are *not* (exactly) its eigenstates. Hence we have to distinguish the mass eigenstates (u, c, t), or (d, s, b), from the slightly different eigenstates of the weak interaction, (u', c', t') and (d', s', b'), respectively.

At this point, we recall that Dirac's 4-component spinor  $\Psi$  actually describes a left-handed and a right-handed fermion; the corresponding spinors are obtained by chiral projection  $\psi_{L,R} = \frac{1}{2}(1 \mp \gamma_5)\Psi$ , cf. footnote 7. The kinetic term in the Lagrangian keeps them apart, but the mass term involves both,  $m\bar{\Psi}\Psi = m(\bar{\psi}_L\psi_R + \bar{\psi}_R\psi_L)$ , so m > 0 breaks the chiral symmetry.

In terms of upper and lower quark doublet components, the mass term takes the form

$$-\mathcal{L}_{\text{quark masses}} = (\bar{d}'_L, \bar{s}'_L, \bar{b}'_L) M_d \begin{pmatrix} d'_R \\ s'_R \\ b'_R \end{pmatrix} + (\bar{u}'_L, \bar{c}'_L, \bar{t}'_L) M_u \begin{pmatrix} u'_R \\ c'_R \\ t'_R \end{pmatrix}.$$
(6)

A transformation to the mass base diagonalizes the matrices  $M_d$  and  $M_u$ ,  $U_{d;L}^{\dagger}M_dU_{d;R} = \text{diag}(m_d, m_s, m_b)$ ,  $U_{u;L}^{\dagger}M_uU_{u;R} = \text{diag}(m_u, m_c, m_t)$ . Thus the weak interaction eigenstates and the mass eigenstates are related by unitary transformations,

$$\begin{array}{c} u'\\c'\\t'\end{array} \right)_{L,R} = U_{u;L,R} \left(\begin{array}{c} u\\c\\t\end{array}\right)_{L,R}, \quad \left(\begin{array}{c} d'\\s'\\b'\end{array}\right)_{L,R} = U_{d;L,R} \left(\begin{array}{c} d\\s\\b\end{array}\right)_{L,R}, \quad (7)$$

 $U_{u;l,R}$ ,  $U_{d;L,R} \in U(3)$ . The Standard Model describes the flavor changing due to the weak interaction by charged currents  $J_{\mu}^{\pm}$ , such as

$$J^{+}_{\mu} = (\bar{u}', \bar{c}', \bar{t}')_{L} \gamma_{\mu} \begin{pmatrix} d' \\ s' \\ b' \end{pmatrix}_{L} = (\bar{u}, \bar{c}, \bar{t})_{L} \gamma_{\mu} \underbrace{U^{+}_{u;L} U_{d;L}}_{V \in U(3)} \begin{pmatrix} d \\ s \\ b \end{pmatrix}_{L} .$$
(8)

Hence flavor changes are parameterized by a unitary matrix *V*, known as the *Cabbibo-Kobayashi-Maskawa* (*CKM*) *matrix*.

For  $N_g$  fermion generations it would be a matrix  $V \in U(N_g)$ , with  $N_g^2$  real parameters. However, the diagonalization still works if we vary any diagonal phase factor in  $U_{u;L}$  and  $U_{d;L}$ , so if we count the physical parameters, we should subtract these  $2N_g$  phases. On the other hand, one common phase in  $U_{u;L}$  and  $U_{d;L}$  leaves V invariant, so that phase should not be subtracted. We end up with

$$N_g^2 - (2N_g - 1) = (N_g - 1)^2$$

<sup>&</sup>lt;sup>9</sup>The graviton might still be added to this list. We also have indirect evidence for Dark Matter, which must be of a different kind.

<sup>&</sup>lt;sup>10</sup>A loophole in this argument are neutrinos, with a very heavy mass >  $m_Z/2 \simeq 46$  GeV, which are, however, considered unlikely.

<sup>&</sup>lt;sup>11</sup>Hadrons are observable particles, composed of quarks and gluons. One distinguishes baryons (with 3 valence quarks, (qqq)) and mesons (with a valence quark–anti-quark pair, ( $q\bar{q}$ )).

physical mixing parameters.

This formula obviously works for one generation (nothing to be mixed). For  $N_g = 2$  there is only one rotation angle, hence an SO(2) matrix is sufficient; this is the Cabbibo angle,  $\theta_c \approx 13^\circ$ . For  $N_g = 3$  we obtain the 3 rotation angles (*e.g.* the Euler angles) plus one complex phase. Kobayashi and Maskawa noticed that this phase *breaks CP symmetry* (if it doesn't vanish), so the aforementioned CP violation does naturally emerge in the Standard Model with  $N_g \geq 3$  generations.

The CKM matrix is well explored now by numerous experiments — its unitarity was a theoretical prediction, which is compatible with the data. This is another argument why more than 3 fermion generations seem unlikely. Actually V is quite close to a unit matrix, with diagonal elements  $|V_{ii}| > 0.97$ . Hence the off-diagonal elements, which enable the generation changes, are suppressed, but the complex phase is clearly non-zero.

#### VI.2. ... and how about the leptons?

The way the Standard Model was traditionally formulated, it does not include right-handed neutrinos (as we mentioned before), and all neutrino masses vanish. Still, there are flavor changing lepton currents, in analogy to the quark current (8),

$$j_{\mu}^{+} = (\bar{v}_{e'}^{\prime}, \bar{v}_{\mu}^{\prime}, \bar{v}_{\tau}^{\prime})_{L} \gamma_{\mu} \begin{pmatrix} e^{\prime} \\ \mu^{\prime} \\ \tau^{\prime} \end{pmatrix}_{L} = (\bar{v}_{e}, \bar{v}_{\mu}, \bar{v}_{\tau})_{L} \gamma_{\mu} U_{n;L}^{\dagger} U_{e;L} \begin{pmatrix} e^{-} \\ \mu^{-} \\ \tau^{-} \end{pmatrix}_{L} .$$
(9)

However, in this case the choice of the matrix  $U_{n;L}$  is completely free — if all neutrino masses vanish, there is no condition for the diagonalization of their mass matrix. In particular we are free to choose  $U_{n;L} = U_{e;L}$ , so the matrix, which would correspond to the CKM matrix, can be set to 11. This shows that no physical mixing effects — analogous to the quark sector — can be expected, *in this original form of the Standard Model*.

We can turn this statement the other way round: if a transmutation of  $\nu$ -flavors is observed, we can conclude that also for neutrinos the flavor and mass eigenstates differ, and therefore they cannot be all massless. We now know that this is Nature's choice, as we are going to review next.

#### VII. NEUTRINO OSCILLATION: A CHAMELEON-LIKE METAMORPHOSIS

In 1957 Pontecorvo formulated a first idea that neutrinos could somehow transform into each other. This early suggestion was an oscillation between neutrino and anti-neutrino,  $v \leftrightarrow \bar{v}$ , which would violate the conservation of the lepton number *L*. In 1962, the year when the neutrino  $v_{\mu}$  was discovered, Ziro Maki, Masami Nakagawa and Shoichi Sakata at Nagoya University (Japan) considered the possibility of massive neutrinos, and suggested that their mass eigenstates could be superpositions of  $v_{e}$  and  $v_{\mu}$ . In 1968

it was again Pontecorvo who elaborated a full-fledge theory for this scenario, and for the resulting  $v_e \leftrightarrow v_{\mu}$  oscillation, which changes the generation-specific lepton numbers  $L_e$  and  $L_{\mu}$ , but not L.

This 2-flavor setting is convenient for illustration: we denote the mass eigenstates as  $v_1$ ,  $v_2$ . As we saw in the discussion of the CKM quark mixing matrix, this case only involves one physical mixing parameter, namely the rotation angle of an SO(2) matrix,

$$\left(\begin{array}{c} \nu_{\rm e} \\ \nu_{\mu} \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{array}\right) \left(\begin{array}{c} \nu_{1} \\ \nu_{2} \end{array}\right) \,.$$

Let us assume a plane wave dynamics for the mass eigenstates, which we write as *kets* (in Dirac's notation),

$$|v_i(t)\rangle = \exp(-i(E_i t - \vec{p_i} \cdot \vec{r})) |v_i(0)\rangle, \quad (i = 1, 2).$$

The distance that the neutrino has travelled — after its start at time t = 0 — is (in natural units)  $L \simeq t$ ; the mass is so small that it is ultra-relativistic even at modest energy. This also implies  $m_i \ll |\vec{p_i}| = p_i \approx E_i$ , and we obtain

$$E_i - p_i = \sqrt{p_i^2 + m_i^2} - p_i \approx m_i^2/(2p_i) \approx m_i^2/(2E_i) ,$$

which simplifies the propagation to

$$|v_i(t)\rangle = \exp(-\mathrm{i}m_i^2 L/(2E_i)) |v_i(0)\rangle$$

In the framework of this approximation, an initial state  $|v_e\rangle$  is converted into  $|v_{\mu}\rangle$  (or vice versa), after flight distance *L*, with probability

$$P_{e\leftrightarrow\mu} = |\langle \nu_{\mu} | \nu_{e} \rangle|^{2} = \sin^{2}(2\theta) \sin^{2}\left(\frac{\Delta m_{12}^{2}L}{4E}\right), \quad \Delta m_{12}^{2} = m_{2}^{2} - m_{1}^{2}.$$
(10)

Intuitively, the initial state  $|\nu_e\rangle$  consists of a peculiar superposition of  $|\nu_1\rangle$  and  $|\nu_2\rangle$ , but these components propagate with different speed. Therefore the composition changes to new states, which mix  $|\nu_e\rangle$  and  $|\nu_{\mu}\rangle$ .

It is straightforward to extend this approach to the case of 3 flavors and 3 mass eigenstates  $|\nu_i\rangle$ ,

$$\begin{pmatrix} \nu_{e} \\ \nu_{\mu} \\ \nu_{\tau} \end{pmatrix} = U_{\text{PMNS}} \begin{pmatrix} \nu_{1} \\ \nu_{2} \\ \nu_{3} \end{pmatrix}, \quad U_{\text{PMNS}} \in U(3) ,$$
(11)

where  $U_{PMNS}$  is the *Pontecorvo-Maki-Nakagawa-Sakata* (*PMNS*) *matrix*. As we saw in the case of the CKM matrix, there are now 3 mixing angles plus one complex phase, which could imply an additional CP symmetry breaking, now in the lepton sector.

In this case, the oscillation probability is  $\propto \sin^2(\Delta m_{ij}^2 L/(4E))$ , so we can determine  $|\Delta m_{12}^2|$ ,  $|\Delta m_{23}^2|$  and  $|\Delta m_{13}^2|$  (they are not independent, hence one can focus on two of them).

Experiments are built with a given average neutrino energy *E* and a fixed baseline *L*. If two  $|\Delta m_{ij}^2|$  are sufficiently different, an appropriate ratio L/E selects to which one the experiment is most sensitive. Initially this is uncertain, but fortunately for the experimentalists it turned out that  $|\Delta m_{12}^2| \approx 30 |\Delta m_{23}^2|$ .

The former (latter) was crucial for the observation of solar (atmospheric) neutrinos, see below.

So this can be tested experimentally, but in practice this is a delicate task: many attempts to probe this behavior ended up with results that were not fully conclusive. This changed at the dawn of the new millennium, with the experiments that were awarded the 2015 Nobel Prize.

#### VII.1. Atmospheric neutrinos viewed by Super-Kamiokande

In 1996 the experiment *Super-Kamiokande* was launched, as an extension of the previous Kamiokande. It is located in the Mozumi zinc mine, near the town Kamioka (now part of Hida) in central Japan, about 1000 m underground. Such locations deep underground are standard for neutrino experiments (and also for Dark Matter search), because of the shielding from the background radiation, which is a major challenge for the experimentalists.

Super-Kamiokande used 50 000 t of water as a Cherenkov detector. It focused on *atmospheric neutrinos*, which we briefly mentioned in Section 3: high energy cosmic rays hit our atmosphere and generate a shower of secondary particles, in particular light mesons (pions and kaons), which subsequently decay into leptons, including neutrinos. Examples are the charged pion decays,

$$\begin{aligned} \pi^+ &\to \mu^+ + \nu_\mu, \ \mu^+ \to e^+ + \nu_e + \bar{\nu}_\mu \qquad \text{or} \\ \pi^- &\to \mu^- + \bar{\nu}_\mu, \ \mu^- \to e^- + \bar{\nu}_e + \nu_\mu \ , \end{aligned}$$

*i.e.* successions of the decays (3) and (4). The flux of cosmic rays is well-known, so also the resulting neutrino flux could be predicted: the ratio between the number of  $\mu$ -(anti-)neutrinos and e-(anti-)neutrinos should be about 2:1, as in our example. Cosmic rays arrive isotropically, and — as we mentioned in Section 3 — crossing the Earth reduces the neutrino flux only by a negligible fraction of  $O(10^{-18})$ . Does this mean that the neutrino flux observed in the Mozumi mine is isotropic as well?

Super-Kamiokande monitored neutrino reactions, which involve charged currents and emit  $e^{\pm}$  or  $\mu^{\pm}$ , examples are given in scheme (5). This causes water Cherenkov radiation, which indicates the neutrino direction and energy; the high energies — up to several GeV — distinguish them from the background neutrinos. The profile of the Cherenkov cone further reveals whether it was triggered by an  $e^{\pm}$  or by a  $\mu^{\pm}$ , and therefore if its origin was an atmospheric e- or  $\mu$ -neutrino (though  $\nu$  and  $\bar{\nu}$  could not be distinguished).

For the  $v_e$  and  $\bar{v}_e$  flux, the prediction was well confirmed, and its isotropy too. This was *not* the case for the  $v_{\mu}$  and  $\bar{v}_{\mu}$  flux: here part of the expected neutrinos were missing, and the flux from above was significantly larger than the one from below (after passing through the Earth). This was announced in 1998, after two years of operation, based on 5000 neutrino signals.

In light of this section, the explanation is clear: part of the missing  $\mu$ -neutrinos were transformed into  $\tau$ -neutrinos! This

oscillation takes a while, this is why it happens mostly along the extended path across the Earth. The precise angular distribution reveals the oscillation rate as a function of the travelling distance *L*, divided by the  $\nu_{\mu}$  energy *E*. This determines the difference  $|\Delta m_{23}^2| = |m_3^2 - m_2^2| \approx 2.4 \cdot 10^{-3} \text{ eV}^2$ . That has been confirmed later by experiments with accelerator neutrinos, which attain O(1) GeV.



Figure 6. On top: Illustration of the Super-Kamiokande experiment on atmospheric neutrinos. Cosmic rays generate air showers of secondary particles, including neutrinos. The e-neutrino flux arrives as predicted, but for a long path part of the  $\mu$ -neutrinos are converted into  $\tau$ -neutrinos. Bottom: The atmospheric  $v_{\mu}$  plus  $\bar{v}_{\mu}$  flux, as observed by Super-Kamiokande, as a function of the travelling distance *L* divided by the neutrino energy *E*. The vertical axis is the ratio between measured flux and the prediction without neutrino oscillation.

#### VII.2. The solar neutrino puzzle and its solution by SNO

Almost all our activities are driven by solar energy. For  $4.5 \cdot 10^9$  years the Sun has been shining with a luminosity of  $3.8 \cdot 10^{26}$  W, and it is expected to continue doing so for another  $4.5 \cdot 10^9$  years. Until the 19<sup>th</sup> century the origin of all this energy seemed mysterious: a chemical process was assumed, but estimates showed that the Sun could only burn for 6000 years, even under the "most optimistic assumption" that it consisted of coal.

In the 20<sup>th</sup> century *nuclear fusion* was identified as the energy source of the Sun, in particular the "pp chain reaction", which amounts to

$$p + p + p + p \rightarrow \dots \rightarrow {}^{4}He + 2e^{+} + 2\nu_{e}$$

If we divide the solar luminosity by the energy, which is released by this chain reaction (26.7 MeV), we obtain the fusion rate, as well as an estimate for the  $v_e$  production ( $\approx 2.10^{38} \text{ s}^{-1}$ ). In addition there are a number of sub-dominant processes, which emit electron neutrinos of higher energies.

The entire spectrum ranges from about  $E_{\nu_e} \approx (0.1...10)$  MeV, and the flux arriving at the Earth was quite well predicted already in 1957, when the neutrino was just discovered. Since the 1960s it was also measured, first in the Homestake gold mine in South Dakota, but the data confirmed only about 1/3 of this flux. This *solar neutrino puzzle* persisted for more than 30 years.

Various solutions were discussed, such as corrections to the solar model, but the latter was constantly improved, in particular by John Bahcall and collaborators, which led to the Standard Solar Model. This model was refined to a point that made it truly difficult to still raise objections which could reduce the  $v_e$ -flux that much. Another explanation, which had been discussed for decades, was finally confirmed in 2001: the solution to this puzzle by *neutrino oscillation* this scenario had been suggested first by V.N. Gribov and B. Pontecorvo in 1969.

The breakthrough was due to the *Sudbury Neutrino Observatory* (*SNO*) in Ontario, Canada, 2000 m underground. In its crucial experiment, 9500 photomultipliers monitored a sphere with 6 m radius, which contained 1000 t of *heavy water*,  $D_2O$  (compared to ordinary water,  $H_2O$ , a neutron is added to each proton, thus forming deuterium, D). This offered several options for the detection of neutrino events:

- The variant of the β-decay shown in Figure 3, with an incoming v<sub>e</sub> and an outgoing electron; which measures exclusively the v<sub>e</sub> flux.
- A deuterium dissolution,  $D + v_x \rightarrow n + p + v_x$ ,  $x \in \{e, \mu, \tau\}$ . That process measures the total neutrino flux without distinction, *i.e.* the sum of  $v_e$ ,  $v_{\mu}$  and  $v_{\tau}$  neutrinos.
- Elastic  $v_x e^-$  scattering enables a good identification of the direction, which affirmed that the observed neutrino flux indeed originates from the Sun. (Only for  $v_e$  the scattered particles can also be exchanged.)

The total flux is well compatible with the prediction by the Standard Solar Model. On the other hand, this model predicts solely  $v_e$ -production, but the first process accounts for only  $\approx 1/3$  of the expected  $v_e$ -flux, in agreement with earlier experiments. Taken together, these results imply that 2/3 of the solar  $v_e$  have been transformed into other flavors before they reach us.

If neutrinos can oscillate, we can expect all flavors to be equally frequent after a long path, like the  $1.5 \cdot 10^{11}$  m that separate us from the Sun, which yields a  $\nu_e$  survival probability of 1/3. Moreover, neutrino oscillation takes place already inside the Sun, before the neutrinos leave it, enhanced by the medium.

This is the ultimate demonstration that neutrino oscillation *is* the solution to the long-standing solar neutrino puzzle, as Gribov and Pontecorvo had conjectured.



Figure 7. The Standard Solar Model predicts the generation of numerous electron neutrinos  $v_e$  inside the Sun, such that a flux  $\approx 6 \cdot 10^{10} v_e/(\text{cm}^2 \cdot \text{s})$  was expected at the Earth. Only 1/3 of them arrive as  $v_e$ , the rest is transmuted into  $v_\mu$  or  $v_\tau$  by means of neutrino oscillation, as illustrated on top. This was conclusively demonstrated by the SNO Laboratory, which used a spherical detector filled with heavy water, shown on bottom.

### VIII. STATUS TODAY: PMNS MATRIX AND OPEN QUESTIONS

Meanwhile a host of experiments confirmed these observations on atmospheric and solar neutrinos: some detected reactor neutrinos at distances of O(100) km, confirming the atmospheric  $\nu_{\mu} \leftrightarrow \nu_{\tau}$  oscillation, while accelerator neutrinos are consistent with the solar  $\nu_e \leftrightarrow \nu_{\mu}$ ,  $\nu_{\tau}$  transmutation. By global fits, the absolute values of the PMNS matrix elements in eq. (11) are quite well determined,

$$\begin{pmatrix} |U_{e1}| & |U_{e2}| & |U_{e3}| \\ |U_{\mu1}| & |U_{\mu2}| & |U_{\mu3}| \\ |U_{\tau1}| & |U_{\tau2}| & |U_{\tau3}| \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.82(2) & 0.55(3) & 0.15(1) \\ 0.37(15) & 0.57(13) & 0.70(9) \\ 0.39(14) & 0.59(12) & 0.68(9) \end{pmatrix}.$$

The reduction of the uncertainties is in progress.

The dark horse is the *complex phase:* it depends on the parameterization how it occurs in this matrix, but the physically interesting aspect of a leptonic CP violation is still highly uncertain.

It seems natural to assume that the flavors follow the same mass hierarchy as the charged leptons,  $m_1 < m_2 <$ 

 $m_3$ . However, since the neutrino oscillation between any two flavors in vacuum only determines  $|\Delta m^2|$ , an "inverse hierarchy" with  $m_3 < m_1 < m_2$  cannot be ruled out either (so far only  $m_1 < m_2$  is considered safe, based on processes inside the Sun).

In any case, we see that this mixing matrix is much more animated than its counterpart in the quark sector; neutrinos mix strongly! The element with the least absolute value is  $U_{e3}$ ; for quite a while it seemed to be compatible with 0, and people invented theories to explain its possible vanishing until 2012, when the Chinese reactor experiment Daya Bay, as well as RENO in South Korea and Double Chooz in France, showed that it differs from 0, with more than  $5\sigma$  significance (here the baseline was just O(1) km).

Generally, the attempts to search for a systematic "texture" in the PMNS matrix were not that fruitful — it seems that we just have to accept the values for its physical parameters as experimental input.



Figure 8. Left and center: Takaaki Kajita and Arthur McDonald, Nobel Prize laureates 2015. On the right: Bruno Pontecorvo.

• Kajita (born 1959) studied at Saitama University and completed his Ph.D. 1986 at Tokyo University, where he later worked in the Institute for Cosmic Radiation Research. He led the group at Super Kamiokande, which found evidence for the oscillation of atmospheric neutrinos. In 1999 he became director of the Research Center for Cosmic Neutrinos in Tokyo.

• McDonald (born 1943) studied at Dalhousie University (Halifax, Canada) and did his Ph.D. at the California Institute of Technology. He worked from 1970 to 1982 at the Chalk River Laboratories near Ottawa, from 1982 to 1989 at Princeton University, then he became director of the Sudbury Neutrino Observatory (SNO), which solved the solar neutrino puzzle.

• If he were still alive, then Pontecorvo (1913-1993) should be another 2015 Nobel Prize winner, as the leading theorist involved. He worked in Rome with Enrico Fermi, and later in Paris, Montreal and Liverpool. In 1950 he moved to the Joint Institute for Nuclear Research (JINR) in Dubna (near Moscow), where he elaborated the theory of neutrino oscillation. On this basis, he and Vladimir Gribov predicted in 1969 the correct solution to the solar neutrino puzzle.

Moreover, this still leaves the question open how large the neutrino masses really are — the PMNS matrix only contains information about their mass squared *differences*. The masses themselves are even more difficult to determine, and alternative techniques are required: one approach is the study of the  $\beta$ -decay to an extreme precision — in particular the electron spectrum near the endpoint is slightly sensitive to the neutrino mass. Such a study is ongoing in the KArlsruhe TRItium Neutrino (KATRIN) experiment in Germany, which has the potential improve the current bound of  $m_{\nu_{\tilde{e}}} < 2.3$  eV (by the experiments Mainz in Mainz and Troitsk in Russia) by an order of magnitude.

There are also cosmological estimates and bounds for the neutrino masses, though they necessarily involve some model dependence. In any case, the absolute values will be relevant for cosmology. Even if the neutrino masses are tiny, their sum — all over the Universe one estimates  $O(10^{89})$ neutrinos — could well be powerful: for instance, the exact masses could, along with the amount of Dark Matter, be crucial for our long-term future, regarding the question if the Universe will keep on expanding for ever, or if it will end in a Big Crunch — let's see ...

#### A. NEUTRINO MASSES ARE STILL PUZZLING

In the traditional form of the Standard Model, the first fermion generation contains the following leptons and quarks,

$$\left( \begin{array}{c} v_{\mathrm{e};L} \\ \mathrm{e}_{L} \end{array} 
ight)$$
,  $\mathrm{e}_{R}$ ,  $\left( \begin{array}{c} u_{L} \\ d_{L} \end{array} 
ight)$ ,  $u_{R}$ ,  $d_{R}$ ,

where each entry represents a Dirac spinor field, and we now keep track of left- and right-handed fermions separately. For instance the term for the electron mass  $m_e$  takes the form  $m_e(\bar{\mathbf{e}}_R\mathbf{e}_L + \bar{\mathbf{e}}_L\mathbf{e}_R)$ . However, this explicit mass term must not appear in the Lagrangian:  $\mathbf{e}_L$  and  $\mathbf{e}_R$  couple differently to the electroweak gauge fields, so this term would break gauge invariance.

Instead the Higgs field

$$\Phi = \left(\begin{array}{c} \phi_+ \\ \phi_0 \end{array}\right) \in \mathbb{C}^2$$

comes to the rescue and endows the gauge invariant Yukawa term

$$-\mathcal{L}_{\text{Yukawa}} = f_e \left[ \bar{\mathbf{e}}_R \, \Phi^{\dagger} \cdot \begin{pmatrix} \nu_{e;L} \\ \mathbf{e}_L \end{pmatrix} + (\bar{\nu}_{e;L}, \bar{\mathbf{e}}_L) \cdot \Phi \, \mathbf{e}_R \right],$$

where  $f_e$  is a (dimensionless) Yukawa coupling. The Higgs potential arranges for spontaneous symmetry breaking. If the Higgs field takes the classical ground state configuration

$$\Phi_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ v \end{pmatrix}, v \simeq 246 \,\text{GeV} \Rightarrow \mathcal{L}_{\text{Yukawa}} = -f_e v \left[\bar{\mathbf{e}}_R \mathbf{e}_L + \bar{\mathbf{e}}_L \mathbf{e}_R\right], m_e = f_e v,$$

while the neutrino remains massless.

The analogous term for the quark doublet (with a Yukawa coupling  $f_d$ ) leads to the *d*-quark mass  $m_d = f_d v$ . But how do we give mass to the *u*-quark? One could introduce an additional Higgs field, but the Standard Model is economic and recycles  $\Phi$ : another quark Yukawa term is added, with

$$\tilde{\Phi} = \begin{pmatrix} -\phi_0^* \\ \phi_+^* \end{pmatrix} \text{ instead of } \Phi, \text{ and we obtain } m_u = -f_u v (f_u < 0 \text{ is allowed}).$$

If we want to construct a *neutrino mass*, we can do exactly the same, *if* we add a right-handed neutrino,  $v_{e;R}$ . It turns out that  $v_{e;R}$  is "sterile"; it does not have any charge, so it does not couple to any gauge field. It could have hidden from our detectors, and it is a Dark Matter candidate.

One often hears the statement that the neutrino mass is "beyond the Standard Model". While this is ultimately a matter of semantics, we would like to emphasize that neutrino masses can be constructed in the same way as it is done for the *u*, *c*, and *t*-quark, so this does not necessarily require a conceptual extension of the Standard Model.

Alternative approaches do speculate about conceptual novelties, like a dimension 5 mass term,<sup>12</sup> or even higher space-time dimensions, but we are not going to discuss them.

We just add that the presence of  $v_R$  opens the door to new scenarios (we do not specify the generation anymore). In general, the C transformation (charge conjugation) of a fermion field  $\Psi$  reads

$$\mathsf{C} \; : \; \Psi \to \Psi^{\mathsf{C}} = C \bar{\Psi}^{T}$$

where *T* means "transposed", and *C* is a matrix that fulfills suitable conditions. Therefore the *Majorana spinors* 

$$\boldsymbol{\nu}_1^{\mathrm{M}} = \boldsymbol{\nu}_R + \boldsymbol{C} \bar{\boldsymbol{\nu}}_R^T = \boldsymbol{\nu}_R + \boldsymbol{\nu}_L^C \,, \quad \boldsymbol{\nu}_2^{\mathrm{M}} = \boldsymbol{\nu}_L + \boldsymbol{C} \bar{\boldsymbol{\nu}}_L^T = \boldsymbol{\nu}_L + \boldsymbol{\nu}_R^C$$

are C-invariant; each of them represents a *Majorana neutrino*, which is its own anti-particle. In one generation we obtain one Majorana neutrino with the chirality components  $v_R$  and  $\bar{v}_L$ , and the other one with  $v_L$  and  $\bar{v}_R$ .

This construction yields real, *i.e.* neutral spinor fields. In Dirac's and Weyl's original approaches, the  $\gamma$ -matrices are chosen such that the Dirac operator  $(i\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - m)$  contains complex elements, which was considered as an argument that fermions should have some charge, and the corresponding operators generate distinct particles and anti-particles.

However, in the 1930s Ettore Majorana found a way to fulfill the conditions of the Dirac algebra ( $\gamma^{\mu}\gamma^{\nu} + \gamma^{\nu}\gamma^{\mu} = 2g^{\mu\nu}$ ) with purely imaginary  $\gamma$ -matrices, such that the Dirac operator becomes entirely real, which disproved this argument, and showed that neutral fermions are another option.<sup>13</sup>

In fact, it is conceivable that the neutrinos are Majorana particles, and not "Dirac neutrinos" as we assumed in the main part of this article. Then the counting of the physical parameters in the mixing matrix has to be reconsidered: roughly speaking, we argued before that the U(3) matrix in eq. (9) has 9 parameters, but — with massive neutrinos — each fermion field in the current  $j^+_{\mu}$  can absorb one phase (but one common phase cancels), so we are left with 9 - (6 - 1) = 4 physical parameters. If we insert Majorana neutrinos instead, these three fields cannot absorb any phase, and there is no common phase either. So in that case there are 9 - 3 = 6 physical parameters, which include 3 *complex phases*.

For Majorana fermions, an explicit mass term

$$\mathcal{L}_{\text{Majorana mass}} = -\frac{\mathcal{M}}{2} \bar{\nu}^{\text{M}} \nu^{\text{M}}$$

can be incorporated directly in the Lagrangian. Then the theory contains another dimensional parameter, the Majorana mass  $\mathcal{M}$  (not related to the Higgs mechanism), in addition to v, without breaking gauge symmetry. It does, however, break the conservation of the total lepton number  $L = L_e + L_\mu + L_{\tau}$ .<sup>14</sup> After the observation that neutrino oscillation violates the separate  $L_e$ ,  $L_\mu$  and  $L_\tau$  conservation, could it be that not even L is on safe ground?

Back in 1939, Wendell Furry pointed that a *neutrinoless double*  $\beta$ -*decay*  $2n \rightarrow 2p + 2e^-$  would confirm this scenario; it changes  $L \rightarrow L + 2$ . Moreover, the decay rate would be  $\propto M^2$ , so this is a way how experiment could confirm that neutrinos are of Majorana type, and explore their masses. The ordinary double  $\beta$ -decay (with  $2\bar{\nu}_e$  emission) has been observed since 1987, but the hunt for its *neutrinoless* counterpart is still going on: some events were reported, but the community is not convinced.<sup>15</sup> The consensus so far is a lower bound of  $\approx 2 \cdot 10^{25}$  years for the life time.

Last but not least, Majorana neutrinos enable the *seesaw mechanism*, which is popular as a possible explanation why neutrinos are so light (a "hierarchy problem"). It was suggested by Peter Minkowski in 1977, and we illustrate its simplest form ("type 1") in one generation.

We endow the Majorana spinor fields  $v_1^M$ ,  $v_2^M$  with a "Dirac mass" im (a coupling between components of distinct Majorana fields with different chirality; for later convenience we choose it imaginary), and a "Majorana mass" M (it would be the Majorana mass of  $v_1^M$ , in the absence of  $v_2^M$ ),

$$-\mathcal{L}_{\text{neutrino masses}} = \frac{1}{2} (\bar{\nu}_L, \bar{\nu}_L^C) \begin{pmatrix} 0 & \text{im} \\ \text{im} & M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nu_R^C \\ \nu_R \end{pmatrix} + \text{Hermitian conjugate} .$$

Really physical are the Majorana masses for the eigenstates, *i.e.* the eigenvalues of this matrix. In particular, for  $M \gg m$  we obtain

$$\mathcal{M}_{\text{small}} \simeq \frac{m^2}{M} \ll \mathcal{M}_{\text{large}} \simeq M$$
.

The more we amplify  $\mathcal{M}_{\text{large}}$  (by increasing *M*), the more we suppress  $\mathcal{M}_{\text{small}}$ . This setting of injustice inspired the term "seesaw mechanism".

If we choose *m* somewhat above the vacuum expectation value of the Higgs field,  $v \leq m = O(1)$  TeV, and insert a huge  $M \approx 10^{24} \dots 10^{25}$  eV, we obtain a very light neutrino, with a realistic mass  $\mathcal{M}_{small} \approx 0.1 \dots 1$  eV. In this scenario,  $\mathcal{M}_{large}$  has the magnitude of the energy, where a Grand Unification of the electroweak and strong interactions is expected ("GUT scale", somewhat below the Planck scale  $\approx 10^{28}$  eV), which many theorists find appealing.

<sup>12</sup>A term of this kind is  $\propto \left[ (\bar{\nu}_L, \bar{e}_L) \cdot \tilde{\Phi} \right] \left[ \tilde{\Phi}^{\dagger} \cdot \begin{pmatrix} \nu_L \\ e_L \end{pmatrix} \right]$ , which is not renomalizable, but it does not require any  $\nu_R$ . <sup>13</sup>Majorana did not publish the work with this insight himself, but he told Fermi about it, and allowed him to do so in his name. This paper appeared in the Italian journal *Nuovo Cimento* in 1937, one year before Majorana mysteriously disappeared.

 $<sup>^{14}</sup>$ It also changes the difference between baryon and lepton number, B - L. This is the quantity, which is strictly conserved in the Standard Model. Combined *B* and *L* anomalies are conceivable, but not observed.

<sup>&</sup>lt;sup>15</sup>A drama began in 2001, when part of the Heidelberg-Moscow Collaboration claimed evidence for the decay  ${}^{76}_{32}$ Ge  $\rightarrow {}^{76}_{34}$ Se + 2e<sup>-</sup>, but it was refuted by other experts, including members of the same collaboration.

# LO MEJOR DE IBEROAMÉRICA LO PUSO UN CUBANO

Fue Michel Romero Rodríguez, estudiante del IPVCE "Carlos Roloff" de Cienfuegos, quien logró la mejor puntuación de Latinoamérica y una medalla de bronce en la cuadragésimosimo sexta Olimpiada Internacional de Física, celebrada del 5 al 12 de

julio de 2015 en Mumbai, India. Michel logró 17.7 puntos en el examen teórico y 10.7 en el experimental (un desbalance que se repite una y otra vez en los competidores cubanos), para colocarse a la cabeza de Iberoamérica.



2015: el año del bronce. A la izquierda, Michel Rodríguez luce su medallas de bronce obtenida en la Olimpíada Internacional de Física del 2015, junto al profesor Alberto Mawad. A la derecha, el profesor Rafael Elpidio Rodríguez Pino escoltado por los estudiantes Samuel Martínez Alcalá y Joan Andrés Nieves Cuadrado a su diestra y siniestra, respectivamente, tras la clausura de la Olimpíada Iberoamericana de Física de 2015.

Nuestro país, sin embargo, estuvo por debajo de su "performance" habitual en la Olimpiada Iberoamericana de Física que tuvo lugar en Septiembre de 2015 en Bolivia. Los estudiantes de duodécimo grado Joan Andrés Nieves Cuadrado (IPVCE "Luis Urquiza Jorge", de Las Tunas) y Samuel Martínez Alcalá (IPVCE "Amistad Cuba-Suecia", de Mayabeque) obtuvieron sendas medallas de

bronce. El profesor Rafael Elpidio Rodríguez Pino, del IPVCE "Máximo Gómez" (Camagüey) condujo la nave cubana.

J. M. Mora IPVCE "Carlos Marx" Matanzas

# TRES DÉCADAS DE LEGADO



Dos directores sorprendidos en el Acto. La doctora Nancy Martínez -actual directora del IMRE - sonríe ante una acotación del tercer director del instituto, Carlos Rodríguez Castellanos, durante el acto celebrado en el Aula Magna de la Universidad de La Habana el 1 de julio de 2015.

El miércoles 1 de julio de 2015 se celebró el trigésimo aniversario de la fundación del Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE) en el Aula Magna de la Universidad de La Habana. Asistieron a la ceremonia el doctor Gustavo Cobreiro, rector de la alta casa de estudios, y la doctora Marisol González, directora de Ciencia y Técnica del Ministerio de Educación Superior, entre otros.

Nacido como Instituto de Materiales y Reactivos para la Electrónica, el IMRE fue creado en 1985 bajo la dirección del desaparecido Leonel Pérez Marín. Su objetivo fundamental era el de contribuir a la pujante industria electrónica desde la óptica de la Ciencia de los Materiales – con contribuciones balanceadas entre la Física y la Química.

A lo largo de tres décadas, el IMRE puede ufanarse de su amplia producción científica en múltiples terrenos, en estrecha cooperación con las facultades de Física y de Química de la Uniersidad de La habana: zeolitas, celdas solares, materiales magnéticos y superconductores, ferroelectricidad, polímeros, fabricación de sensores e instrumentos para el diagnóstico de enfermedades y su terapia, tecnología láser, análisis químico, caracterización física de materiales, etc.

El acto de celebración se desarrolló en el contexto de la Tercera Conferencia Internacional sobre Ciencia de los Materiales en la Era de la Sostenibilidad, en la que particioaron 37 delegados

extranjeros de países como España, Noruega, Turquía, Brasil, México, Francia, Alemania.

E. Altshuler

# SE QUEDA EN EL ICIMAF EL PREMIO SOFIA KOVALEVSKAYA 2015 DE FÍSICA



Elizabeth Rodríguez Querts, investigadora del ICIMAF

La Comisión de Mujeres científicas de la Academia de Ciencias de Cuba otorga cada dos años los premios "Sofia Kovalievskaia", bajo el auspicio de la Fundación Kovalievskaia, que presiden los esposos Neal y Ann Koblitz, de Estados Unidos. El premio honra a una eminente matemática rusa del Siglo XIX, quien no solo obtuvo resultados en el área de las ecuaciones diferenciales, sino que fue una luchadora por la incorporación de

las mujeres a las Universidades.

En la presente edición del premio, Elizabeth Rodriguez Querts, del ICIMAF, resultó ganadora en ciencias físicas, mientras Karina García Martínez y Margarita Suárez eran las ganadoras en los campos de la Matemática y de la Química, respectivamente. Elizabeth ha merecido el reconocimiento por su consistente aporte a la Física de las altas energías (especialmente en presencia de campos magnéticos), con implicaciones en la Astrofísica.

M. Sánchez-Colina

# LA COMISIÓN INTERNACIONAL DE ÓPTICA PREMIA A PROYECTO CUBANO

La Comisión Internacional de Óptica (ICO), para impulsa actividades asociadas al Año Internacional de la Luz, ha creado el Premio ICO para la promoción de la Óptica y la Fotónica.



*Óptica para ver el cielo.* En la foto, el telescopio principal del Observatorio Astronómico de la Universidad de La Habana, tras cuya reparación por parte de los autores del proyecto ganador, es utilizado para que jóvenes y niños observan el firmamento habanero. (Foto: M. de La Guardia).

El grupo cubano "Jóvenes observadores del Cielo en La Habana, los científicos del futuro en Óptica y Fotónica" ganaron uno de los premios otorgados por la ICO. El grupo, mayoritariamente

asociado a la Universidad de La Habana, ha realizado una sostenida labor de divulgación científica dirigida a niños y jóvenes en el campo de la astronomía. Su trabajo incluye la familiarización de los asistentes con varios telescopios astronómicos: un primer acercamiento de las nuevas generaciones al mundo de la Óptica.

Al Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE) de la Universidad de La Habana pertenecen Osmel Cruzata (Jefe de Proyecto), Bradies Lambert, Mónica de La Guardia e Ivette Rabelo. Los participantes Edwin Pedrero, Luis Ponce y Teresa Flores son miembros de la Cátedra de Cultura Científica "Félix Varela" de la Universidad de La Habana, mientras que Arturo Abelenda es profesor de la Facultad de Física de la misma universidad. Finalmente, Alejandro Jiménez participa en el proyecto desde el Museo Nacional de Ciencias Naturales.

El primer premio del concurso fue otorgado por la ICO a la Sociedad Española de Óptica (SEDOPTICA) por su labor de popularización de la Óptica y la Fotónica entre estudiantes de Secundaria utilizando el Explorador Fotónico –un "kit" educacional creado por grupos de 11 países europeos.

Para más información, se sugiere al lector visitar la página web de la ICA: http://e-ico.org/node/323

A. Augier E. Altshuler

# QUIMICUBA AL MÁS ALTO NIVEL

Entre los días 13 y 16 de octubre pasados se celebró en las instalaciones del Hotel Meliá Habana el IX Congreso de Ciencias, Tecnología e Innovación Químicas (QUIMICUBA 2015) con una asistencia de cerca de 600 participantes, una tercera parte de ellos no residentes en Cuba. Fue este año notable la asistencia de especialistas asentados en los EEUU que llegó a superar el

centenar. Este evento es el principal auspiciado en Cuba por la Sociedad Cubana de Química (SCQ) y sirve de escenario y encuentro para una multidisciplinaria comunidad, que gracias a ellos establece vínculos de colaboración e intercambio de información muy útiles en el contexto del estado actual de la ciencia y la tecnología en Cuba. La económica cuota de
inscripción según los estándares internacionales actuales (un máximo de 400 €) y la amplísima subvención de la participación de residentes en Cuba, solo limitada por la calidad de los trabajos, marca una pauta de cómo puede hacerse costeable un evento de magnitud intermedia como este cumpliendo su propósito principal: promover la ciencia, la tecnología y la innovación en nuestra Patria. Debe destacarse la participación de dos laureados con el Premio Nobel de Química: el Prof. Martin Karplus (2013) de la Universidad Harvard, en Cambridge, Massachusetts, y el Prof. Peter Agre (2003) de la Universidad Johns Hopkins, en Maryland. Sus charlas y el intercambio con jóvenes científicos y estudiantes resultaron inolvidables y con un valor previsiblemente muy elevado para el futuro de la ciencia cubana, si las condiciones

lo permiten. Adicionalmente se desplegaron iniciativas de colaboración con la American Chemical Society (ACS) de los EEUU y la Royal Society of Chemistry (RSC) del Reino Unido, que pueden tener un impacto notablemente positivo en la vida científica del país.

Luis A. Montero Cabrera Presidente de la SCO

#### Daniel García Rivera

Presidente del Comité Organizador y vicepresidente electo de la SCQ

## CELÉBRASE DÍA INTERNACIONAL DE LA FÍSICA MÉDICA EN LA HABANA

El pasado 6 de noviembre tuvo lugar en el salón "El Cortijo" del Hotel Vedado La Jornada Conmemorativa "Física médica realidades y perspectivas" en saludo al Día Internacional de la Física Médica. El evento fue organizado por la Sociedad de Física Médica (sección de física médica), apoyado por la OPS, HCQ "Hermanos Ameijeiras" y Tema Sinergie. Contó con la

participación de 41 especialistas nacionales que expusieron los resultados de los trabajos científicos presentados este año en eventos nacionales e internacionales, a propósito de las nuevas tecnologías y la importancia de la física médica en su desarrollo.

Sociedad Cubana de Física

### REELEGIDO EL CUBANO CARLOS TRALLERO COMO PRESIDENTE DEL CLAF



Tras la reelección. Grupo de participantes en la 36<sup>a</sup> Reunión del Consejo Directivo de la Centro Latinoamericano de Física (CLAF). quinto de izquierda a derecha es el cubano Carlos Trallero, re-elegido como Presidente del CLAF. En la octava posición de izquierda a derecha se encuentra María Sánchez-Colina, presidenta de la Sociedad Cubana de Física.

Con la participación de: la Directora de la Oficina de la UNESCO en Montevideo, Dra. Lidia Brito, los representantes de los países miembros, así como invitados de varias organizaciones científicas, se realizó durante los días 19 y 20 de noviembre en la Ciudad de México la  $36^a$  Reunión del Consejo Directivo de la Centro Latinoamericano de Física (CLAF).

En la reunión se analizaron vías para ampliar la integración en América Latina y el Caribe a través del perfeccionamiento de los programas que coordina el CLAF y la creación de otros nuevos.

En este sentido se acordó extender la experiencia cubana de realizar una Olimpiada Universitaria de Física. Se acordó que en marzo de 2016 se realizará a modo de experimento y auspiciada por el CLAF y la UNESCO, una Olimpiada con participación de universidades de varios países de la región. Ya ha confirmado su participación la Universidad nacional Autónoma de México.

En la sesión de la tarde del día 19 se reeligió como director del CLAF para el periodo 2016-2020 al Dr. Carlos Trallero Giner, profesor de la Facultad de Física de la Universidad de la Habana.

María Sánchez-Colina

# UN PILAR DE LOS LABORATORIOS DOCENTES: MERCEDES NAVARRO FERNÁNDEZ (24 de septiembre de 1942 – 26 de agosto de 2015)



Mercedes Navarro Fernández (1942 - 2015)

La noticia nos tomó a todos por sorpresa: los vecinos de Mercedes Navarro llamaron por teléfono para dar la noticia de informarnos que *Mercy* había fallecido. Resultaba imposible aceptar que no veríamos más a nuestra querida colega retirada.

Es difícil escribir sobre personas tan sencillas y a la vez tan inmensas durante su vida y labor cuando nos dejan definitivamente. Mercedes Navarro, Auxiliar Docente del Departamento de Física Aplicada de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana, fungió durante más de tres décadas como profesora y como Jefa de laboratorios docentes que forman profesionales en varias ramas fundamentales para el país: Biología, Microbiología, Bioquímica, Ciencias Farmacéuticas, Ciencias de los Alimentos, y Geografía.

Para ella, lograr que cada práctica funcionara a la perfección resultaba un asunto personal: no pocas veces la vimos coordinando la reparación de instrumentos y realizando otros mil ajustes asociados a los laboratorios docentes en los

horarios donde muchos de sus colegas estaban disfrutando del descanso. Supo enfrentar, con ejemplar estoicismo, las duras situaciones que afrontó en su vida sin perder nunca su disposición y entrega a su diaria labor educativa. Si habláramos de las personas que más han contribuido al desarrollo de nuestra docencia de laboratorio durante mucho tiempo, no se podría dejar de mencionar su nombre.

Graduada de Licenciatura en Educación en 1997, la fértil labor de Mercy había comenzado mucho antes como alfabetizadora, continuó en el Instituto Superior de Ciencias Agropecuarias de la Habana (ISCAH) (1976 – 1982) y concluyó en la Universidad de la Habana (UH) (1982 – 2015). No es de extrañar que su fructífera carrera como maestra haya sido reconocida en múltiples formas: Medalla de la Alfabetización, "Medalla Rafael María de Mendive", Medalla "Producción y Defensa", Medalla "por la Educación Cubana", Medalla "40 Aniversario de las FAR", Sellos por los 270 y 280 aniversarios de la Universidad de la Habana, y Diploma del Rector por 30 años de labor ininterrumpida en ese centro docente.

Su dedicación, su sentido de pertenencia y su humanismo, la hicieron merecedora siempre del cariño y respeto de los que trabajamos y fuimos cercanos a ella. Sus alumnos la adoraban: como docente, como persona, como una madre que les dio un certero consejo a muchos cuando lo necesitaban. No pocos profesores jóvenes (y no tan jóvenes) le agradecerán eternamente a Mercy cuanto contribuyó a su formación integral y a sembrar en ellos el amor al trabajo y el respeto por todo lo que hacemos día a día.

Mercedes Navarro demostró con su vida que lo más importante no son los títulos, doctorados o currículos; lo trascendental está en el corazón y la ética con que se trabaja: justamente lo que a ella le sobraba. Ojalá que esa semilla haga florecer muchas Mercys más en la Facultad, en la Universidad y en el país.

Jorge Portelles, René Fundora y Ernesto Altshuler Facultad de Física, Universidad de La Habana

# LEAVING A MARK IN HAVANA: LEO P. KADANOFF (January 14, 1937 – October 26, 2015)



*Kadanoff in Havana.* Leo during his talk "Synchronization: a simple process?" that served as the opening lecture of the scientific meeting "Complex Matter Physics: materials, dynamics and patterns" (MarchCOMeeting'12), celebrated in Havana, from March 6 to 9, 2012. (Photo: O. Ramos).

"I was very impressed by the high quality of physics research in Cuba. There are so many people with good said Leo P. Kadanoff to the Revista Cubana de ideas!" Física in an interview published in 2012<sup>1</sup>. That happened shortly after visiting Cuba in March 2012 to participate in a scientific conference. His determination to join the activity helped "pulling over" a number of other colleagues, which undoubtedly contributed to the high quality of the meeting. He also gave the opening speech, and was the head of the Best Poster Selection board -where he did a really thorough job which served as a source of inspiration to quite a few young Cuban researchers and students. A few months later, while I briefly visited the University of Chicago, he and his wife Ruth<sup>2</sup> invited me to have dinner at their place. In a word; during the few years we were in contact, he revealed

many of his virtues, both scientific and personal ones.

Unfortunately, Leo passed away a few days ago, by October 26. He was born in New York, and did his undergrad and graduate studies at the University of Harvard. While his early work dealt with superconductivity, his best known contributions to Physics are related to the interpretation of second-order transitions in terms of scaling and universality. His insights to that part of Physics are universally accepted as seminal, and were acknowledged in many ways, such as the Buckley Prize of the American Physical Society, the Wolf Prize in Physics, the Boltzmann Medal of the International Union of Pure and Applied Physics, and the Lorenz Medal –I personally believe that a Nobel Prize in Physics could have easily been included in the list.

Even much after his "golden years" of scaling and universality by the late 1960's, Leo had the curiosity and momentum to work in the emerging field of Self-Organized Criticality in the early 1990's; I particularly learned from one his papers were the subject of avalanche distributions in growing sandpiles was studied in a systematic way through simulations –a "humble" approach without grand unification pretentions, but highly illustrative in many ways. Perhaps it was the same scientific humbleness that Leo showed when he approached me during the Havana 2012 meeting with the following comment about a poster authored by a Cuban team: "After discussing with the authors, Ernesto, they were right; I was wrong".

I will miss Leo, as does most of the international Physics community.

Ernesto Altshuler, Facultad de Física, Universidad de La Habana

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>From "A conversation with Leo P. Kadanoff", Revista Cubana de Física, vol. 28, No. 1E, pages 1E4-1E5 (2012) <sup>2</sup>Physicist Ruth Ditzian Kadanoff.

Revista Cubana de Física ISSN 0253-9268 Online ISSN 2224-7939

Revista Cubana de Física ISSN 0253-9268 Online ISSN 2224-7939