

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

FÍSICA

REVISTA CUBANA DE FÍSICA

VOL.34 No.2
DICIEMBRE, 2017

EPPUR SI MUOVE



Portada: Foto de grupo de la Canadian-American-Mexican Graduate Students Physics Conference (USA, agosto 17-19, 2017), con la participación de Cuba por vez primera.

EDITOR

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

EDICIÓN ELECTRÓNICA

J. J. GONZÁLEZ, C. GANDARILLA, E. MARTÍNEZ
Facultad de Física, Universidad de la Habana
jjgonzalez@fisica.uh.cu, cgandarilla@fisica.uh.cu
emartinez@fisica.uh.cu

O. ALMORA
i-MEET, FRIEDRICH ALEXANDER UNIVERSITY
osbel.almora@fau.de

D. MIRAVET
Centro Atómico Bariloche & Instituto Balseiro
dmiravet@cab.cnea.gov.ar

EDITORES ASOCIADOS

A. J. BATISTA-LEYVA, G. ROJAS-LORENZO
INTEC, La Habana
abatista@intec.cu, german@intec.cu

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

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

J. O. FOSSUM
NTNU, Noruega
Jon.fossum@ntnu.no

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

J. LLOVERA
CUJAE, La Habana
llovera@electronica.cujae.edu.cu

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

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

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

E. RAMIREZ-MIQUET
Univ. Paris Diderot
eramirez@univ.-paris-diderot.fr

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

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

Todos los artículos en formato -e:
www.revistacubana.defisica.org

COORDENADAS

- 98 **EPPUR SI MUOVE: YOUNG CUBAN PHYSICISTS TRANSCENDED FRONTIERS AT CAM 2017**
[EPPUR SI MUOVE: JÓVENES FÍSICOS CUBANOS TRASCENDIERON FRONTERAS EN EL CAM 2017]
M. Sánchez-Colina

ARTÍCULOS ORIGINALES

- 100 **CONTAMINATION SOURCE INFERENCE IN WATER DISTRIBUTION NETWORKS**
[INFERENCIA DEL ORIGEN DE CONTAMINACIÓN EN REDES HÍDRICAS]
A. Braunstein, A. Lage-Castellanos, E. Ortega
- 108 **ANGLE-RESOLVED X-RAY PHOTOELECTRON SPECTROSCOPY STUDY OF THE THIOUREA DERIVATIVE ADSORPTION ON Au(111) FROM ETHANOLIC SOLUTION**
[ESTUDIO DE LA ADSORCIÓN SOBRE Au(111) DE UN DERIVADO DE TIUREA EN DISOLUCIÓN ETANÓLICA MEDIANTE ESPECTROSCOPIA DE ELECTRONES]
M. P. Hernández, G. Navarro-Marín, O. Estévez-Hernández, M. H. Farías-Sánchez
- 112 **CÁLCULO DEL PARÁMETRO DE NO EXTENSIVIDAD EN EL MODELO DE INTERACCIÓN FRAGMENTO-ASPEREZA PARA LOS SISMOS DEL ECUADOR MEDIANTE UN MÉTODO BAYESIANO**
[COMPUTATION OF THE NONEXTENSIVITY PARAMETER IN THE FRAGMENT-ASPERITY MODEL FOR THE ECUADORIAN SEISMIC CATALOG BY A BAYESIAN APPROACH]
S. Araujo
- 116 **EXPERIMENTAL STUDY ON THE EFFECT OF Nd:YAG LASER ON DENTAL HARD TISSUE: COMPARISON BETWEEN MULTIPULSE AND FREE-GENERATION MODES**
[ESTUDIO EXPERIMENTAL DEL EFECTO DE UN LÁSER Nd:YAG SOBRE EL TEJIDO DENTAL DURO: COMPARACIÓN ENTRE LOS MODOS DE GENERACIÓN MULTI-PULSO Y LIBRE]
A. Carballosa-Amor, E. Ponce-Flores, H. Tellez-Jimenez, T. Flores-Reyes
- 120 **AUTOMATIZACIÓN DE EXPERIMENTOS CON ARDUINO**
[AUTOMATION OF EXPERIMENTS USING ARDUINO]
J. A. Lesteiro-Tejeda, D. Hernández-Delfín, A. J. Batista-Leyva
- 125 **Er:YAG POLYCRYSTALLINE CERAMICS: USE OF SiO₂ AND B₂O₃ AS SINTERING ADDITIVES AND THEIR EFFECTS ON THE OPTICAL AND STRUCTURAL PROPERTIES**
[CERÁMICAS POLICRISTALINAS DE Er:YAG. EL USO DE SiO₂ Y B₂O₃ COMO ADITIVOS DE SINTERIZACIÓN Y SUS EFECTOS EN LAS PROPIEDADES ÓPTICAS Y ESTRUCTURALES]
L. Moreira, L. Ponce, E. De Posada, T. Flores
- 133 **INTERMITTENT AND CONTINUOUS FLOWS IN GRANULAR PILES: EFFECTS OF CONTROLLING THE FEEDING HEIGHT**
[FLUJOS CONTINUOS E INTERMITENTES EN PILAS GRANULARES: EFECTOS DEL CONTROL DE LA ALTURA DE ALIMENTACIÓN]
L. Alonso-Llanes, L. Domínguez-Rubio, E. Martínez and E. Altshuler
- 136 **EFFECT OF THE ELECTROMAGNETIC FIELD ON THE PHOTOISOMERIZATION OF THE RHODOPSIN MOLECULE**
[EFECTO DEL CAMPO ELECTROMAGNÉTICO SOBRE LA FOTOISOMERIZACIÓN DE LA MOLÉCULA RODOPSINA]
J. Cerutti-Torres, F. Rodríguez-Hernández, A. Martínez-Mesa, L. Uranga-Piña
- 140 **DISEÑO DE PORTA-MUESTRA ROTATORIO PARA LA OPTIMIZACIÓN DEL PROCESO DE SEDIMENTACIÓN DE NANOESTRUCTURAS**
[ROTARY SAMPLE HOLDER DESIGN FOR THE OPTIMIZATION OF THE NANOSTRUCTURES SEEDING]
O. Cruzata, I. Concina, L. Vaillant
- 143 **ESTUDIO DEL ÁTOMO H/II BAJO PERTURBACIONES**
[STUDY OF H/II ATOM THROUGH PERTURBATIONS]
A. Delgado Solano, J. A. Mendoza Suárez

- 152 **VISCOSIDAD MAGNÉTICA: DETERMINACIÓN DE LA RESISTIVIDAD ELÉCTRICA**
[MAGNETIC VISCOSITY: DETERMINATION OF ELECTRICAL RESISTIVITY]
C. Casimiro-Carrazana, B. Rodríguez-Saenz y G. Rojas-Lorenzo

- 158 **REDFIELD DYNAMICS OF A QUANTUM SPHERICAL SPIN**
[DINÁMICA DE REDFIELD DEL SPIN CUÁNTICO ESFÉRICO]
M. T. Pérez-Maldonado, G. Monsivais, R. Mulet

COMUNICACIONES ORIGINALES

- 163 **ESTUDIO DEL ESPARCIMIENTO DE DPPC EN DIFERENTES CONCENTRACIONES APLICANDO TÉCNICAS ÓPTICAS DE SPECKLE DINÁMICO**
[STUDY OF THE SPREADING OF DPPC IN DIFFERENT CONCENTRATIONS APPLYING OPTIC TECHNIQUES OF DYNAMIC SPECKLE]
J.J. Llovera, A. Moreno, J. Cruz, R. Serra, D. Martínez, M. Zotti

MOMENTOS DE LA FÍSICA EN CUBA

- 165 **LA FÍSICA: UNA PROTAGONISTA DE LA TERCERA REVOLUCIÓN EN LA BIOLOGÍA**
[PHYSICS: A MAIN CHARACTER IN THE THIRD REVOLUTION IN BIOLOGY]
C. Cabal-Mirabal

- 168 **OLIMPIADAS UNIVERSITARIAS DE FÍSICA: UN RECORRIDO POR SUS RESULTADOS DESPUÉS DE CINCO EDICIONES**
[UNIVERSITY PHYSICS OLYMPIADS: A JOURNEY THROUGH THEIR RESULTS AFTER FIVE EDITIONS]
H. Borroto, A. Borroto

PARA FÍSICOS Y NO FÍSICOS

- 172 **ONDAS DEL ESPACIO-TIEMPO: EL NOBEL DE FÍSICA 2017**
[WAVES OF THE SPACE-TIME: THE PHYSICS NOBEL 2017]
D. Manreza-Paret, A. Pérez-Martínez

- 179 **NUESTRA FÍSICA EN NOTICIAS**

OBITUARIOS

- 182 **ÁNGEL GILBERTO AUGIER CALDERÍN (1947-2017)**
J. A. Alejo-Díaz, J.J. Llovera
- 184 **LUIS ALBERTO DEL PINO MUÑOZ (1961-2017)**
A. Pérez-Martínez, A. Cabo

EPPUR SI MUOVE: YOUNG CUBAN PHYSICISTS TRANSCENDED FRONTIERS AT CAM 2017

EPPUR SI MUOVE: JÓVENES FÍSICOS CUBANOS TRASCENDIERON FRONTERAS EN EL CAM 2017

M. SÁNCHEZ-COLINA

Presidenta, Sociedad Cubana de Física; maruchy@fisica.uh.cu

I had the pleasure to participate, with 14 Cuban PhD students, in the Canadian-American-Mexican Graduate Student Physics Conference (CAM 2017), celebrated in Washington, D.C. from August 17 to 19 –a historical event in the regional physics scenario.

CAM is a scientific conference organized every two years by the Physical societies of Canada, the US, and Mexico. It is celebrated in venues alternating among the three countries.



Figure 1. A four-country panel. From left to right: Gretel Quintero (Cuba), Christopher Pugh (Canada), Midhat Farooq (USA), and Krista Freeman, president of the organizing committee. The speaker is Ana Aviléz-López, (México).

There were actually a few CAM meetings in the early-mid 90's but the first CAM in its present format took place in Mexico in 2003, and ever since it has established itself as a Congress to promote the collaboration among graduate students and update them about recent progress in Physics. The event is quite unique: it is organized by the students themselves, who run the organizing committee, select invitees, and chair scientific sessions.

The agenda of CAM 2017 included 5 plenary talks, as well as oral and poster presentations by the participating students. In addition, two discussion panels were organized, dealing with the experience of the participants as grad students both from the academic and social points of view. The need of scientific collaboration acted as a natural attractor during the discussions.

An interesting feature of CAM 2017 is that the students who gave oral presentations actually received evaluations from

their peers, which will help them to polish their skills as speakers.

Honoring its slogan “Transcending frontiers”, the event not only crossed professional and geographical frontiers; the presence of Cuba also smashed the political ones.

In fact, the invitation to Cuban students was a proposal of the American Physical Society (APS) made during a meeting between APS leaders and members of the direction board of the Cuban Physical Society (SCF) in March 2016 in Havana. The APS generously took charge of the travel and living expenses of the Cuban participants.



Figure 2. Precision raincoats. Some of the participants in CAM 2017 getting ready to walk to the dinner place with the raincoats provided by the organizing team with amazingly good timing (Photo courtesy of Hari Sharma).

The Cuban delegation was composed of graduate students from the universities of Havana, Camagüey and Las Villas, as well as PhD candidates belonging to the Centro de Inmunología Molecular (CIM), the Instituto de Cibernética Matemática y Física (ICIMAF) and the Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (INTEC).

The Cuban visitors enjoyed the courtesy both from the organizers and from the rest of the participants. I would like to underline the heartfelt words of William Dorland (professor at the University of Maryland and former Chair of the APS Committee on International Freedom of Scientists) who said during his closing speech that he was very satisfied with the presence of Cuban physicists in the conference; something he had thought that he would never be able to see.

Besides the academic rigor, CAM 2017 boasted an impeccable organization, especially thanks to the presence of three key persons: Michele Irwin, Manager of International Programs of the APS, Amy Flatten, Director of International Affairs for APS and the Chair of the APS Forum on Graduate Student Affairs, Krista Freeman, who took care of the organization in minute detail. A curious example of their success was the expedite response to a rain announcement for Friday 17, at 6:30 PM –exactly the time to walk to the banquet location, in a different building. Right at the departure time, all participants were provided raincoats and umbrellas (see Fig. 2): their usefulness was absolutely clear when rain started at 6:30 PM sharp.

The banquet took place at the impressive lobby of the Rayburn building, headquarters of the US House of Representatives. During dinner I had the possibility to publicly acknowledge the organizing committee and the APS on behalf of the SCF; I also made good use of the opportunity to suggest the celebration of the next CAM in Havana, Cuba. The proposal was well received, and, in fact, will be discussed in detail later on. With a spark of Physics humor, someone

suggested that the meeting could be called C²AM (were the two C's would naturally correspond to Canada and Cuba).



Figure 3. Dinner at Capitol Hill. Participants during the banquet that took place at the Rayburn building, Capitol Hill, Washington, D.C.

Besides the rich academic experience, the participation in CAM 2017 offered us the opportunity to visit many attractions of the impressive city of Washington, D.C. like the Capitol, the monument of George Washington, the National Air and Space Museum, and, of course, having a taste of the city's night life.

But above all, the Cuban participation in CAM 2017 showed that Science is a powerful force allowing women and men to transcend frontiers, walls and prejudices of any kind.

CONTAMINATION SOURCE INFERENCE IN WATER DISTRIBUTION NETWORKS

INFERENCIA DEL ORIGEN DE CONTAMINACIÓN EN REDES HÍDRICAS

A. BRAUNSTEIN^a, A. LAGE-CASTELLANOS^{b†} AND E. ORTEGA^b

a) DISAT, Politecnico di Torino, Corso duca degli Abruzzi 24, Turin, Italy HUGEF, Via Nizza 52, Turin, Italy, Collegio Carlo Alberto, Moncalieri, Italy

b) Facultad de Física, Universidad de la Habana. ale.lage@gmail.com

† corresponding author

Recibido 20/3/2017; Aceptado 21/7/2017

We study the inference of the origin and the pattern of contamination in water distribution networks after the observation of contaminants in few nodes of the network.

Se estudia el problema de la inferencia del origen y del patrón de contaminación en una red de distribución a partir de la observación del contaminante en pocos nodos de la red.

PACS: Water Pollution, *92.40.kc, *92.40.qc; Flows in Ducts, 47.60.Dx; Inference methods, 02.50.Tt; Inverse problems, 02.30.Zz; Linear Algebra, 02.10.Ud

I. INTRODUCTION

Fluid networks are ubiquitous and fundamental. They come in a variety of sizes and shapes, from circulatory and lymphatic systems in vertebrates, to ocean conveyor belts and sea currents, passing by industrial fluid networks, water distribution systems in cities and hydrographic basins. In all of these cases, the spread of contamination, defined as the presence in the fluid of non desired material, is problematic. We study how to infer the position in the network at which a contaminant first appeared after the observation of its presence in some distant nodes of the network. This is a relevant question at least in industries and cities, where pipe networks are not susceptible of being explored or sensed at every node, and where future or further damage can be prevented from the knowledge of the contamination source.

The study of contamination origin has received a lot of attention in the near past. Several approaches have been developed [1–7] with the goal of inferring the patient zero after observing an epidemic outbreak. In [8] there is a state of the art of studies made in related topics. However, epidemic models in networks differ from fluid networks in that they are essentially stochastic. Pipe systems can have some source of stochasticity, like turbulence, but to the scope of the present study the movement of the fluid is considered deterministic. The simplicity of fluid networks is compensated by the fact that we will try to infer the origin with very little information, namely the observation of contamination in one or two nodes of the system.

There is a variety of questions related to the inference of contamination in water distribution systems, and a variety of methods and approaches. Some researchers [9] have focused on the inference of the pattern at the origin, after observation of a contamination pattern at an observation node, but under the assumption that both the origin and the observation points are known. In such cases, the target is to reproduce the real-valued time dependent concentration of contaminants.

Instead, we will pay more attention to discovering the unknown source of contamination.

Within the scope of detecting the source of contamination, many researchers make use of extensive forward in time simulations (usually resorting to EPANET) [10–16] to test different possible origins, and compare their predicted patterns with the observed one, or to create a rule that allows them to make inference later on. Some consider that there is a source of stochasticity coming from the uncertainties in the demands on the network at any given time [13, 17] or on the reliability of the sensors [18], and try to infer in such a context, sometimes resorting to Monte Carlo simulations [17] or Bayesian methods [13, 17, 18]. Some have attempted the detection of the origin by directly reversing the flow dynamics in the network [19].

Our approach has some contact points with some of these. As in [13, 17, 18] we formalize our method in Bayesian terms, although we do not consider stochasticity in the demand or on the sensors. We assume a simplified version of the problem, with known deterministic dynamics, where time is discretized and contamination is reduced to be binary (contaminated or not) as in [13]. Our inference method will rely on a neat mathematical approach using linear programming to find the most effective explanation for a contamination event. The linear programming optimization will arise from an Occam's Razor-like argument by the assumption that contamination is a rare event.

Section II establishes the simplifications assumed throughout this work in the modeling of the water distribution networks, and the treatment of their dynamics. A precise statement of our mathematical problem appears in Section III, where it is also transformed into an optimization problem. The results obtained in random models of cities appear in Section V, and everything is summarized at the end.

II. ASSUMPTIONS AND SIMPLIFICATIONS

Fluid networks can be grouped in two big classes, non cyclic and cyclic regarding on whether any piece of fluid is allowed to pass by a given position in the network more than once. Circulatory systems and the ocean conveyor belt are examples of cyclic networks. On the other hand, many industrial and city networks are non cyclic. The procedure presented by us will focus on non cyclic networks. Extensions to cyclic networks might be simple, but have not been explored so far.

Furthermore, we will focus on water distribution networks (WDN), this is, the system of pipes, pumps, elevated tanks, junctures and consuming points that characterize a standard city clean water network. The behavior of such networks are described by the Todini-Pilati equations [20], in which two fundamental constraints, the conservation of mass and the conservation of energy, are grouped in matricial form in the following way

$$\begin{bmatrix} A_{pp} & A_{pn} \\ A_{np} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q \\ H \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -A_{p0}H_0 \\ q \end{bmatrix} \quad (1)$$

On right-hand side, the flow of demand q at the consumption nodes is given, as well as the head pressure H_0 at the pumps and elevated tanks of the city. On the left-hand side, the flow in each pipe Q and the pressure in internal junctures H are to be found in order to satisfy the energy and continuity equations. Detailed explanations of each term and a discussion on the meaning and solution of the equations can be found in [21]. Despite their apparent simplicity, these equations are non-linear, since the elements of the matrix $A_{pp}(i, i) = R_i|Q_i|^{n-1}$ depend on the flows Q we are looking for.

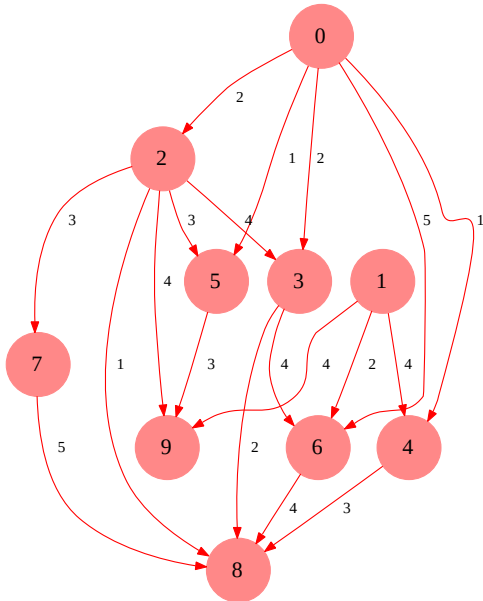


Figure 1. Schematic representation of an abstract water distribution network. Numbers inside nodes are labels. Numbers besides edges are time delays Δ_{ij} .

Inside the matrices A_{pp} , A_{pn} , A_{np} and A_{p0} resides the information about the topology of the network, the radii

of the pipes as well as the drag coefficients inside the pipes. In principle, all these parameters are known (at least approximately) and the flows Q and the fluid velocities v inside the pipes, can be found using free and public modeling software like EPANET [22]. This software allows also the study of the diffusion of contaminants in the network.

However, we will concentrate our effort on studying the direct (forward in time) problem and inverse (inference) problem in a simplified version of the water dynamics. In order to do this we will assume the following simplifications:

- **discrete time:** once the fluid velocities v are known, we obtain the pipe time $\Delta = \text{Round}(\frac{L}{v})$ from the pipe lengths L . We will consider this time Δ an integer, using a suitable discretization. This discretization is used for describing the states s_i^t of each site i , at time t , in the network.
- **binary contamination:** at each time the state of node i can be either clean $s_i^t = 0$ or contaminated $s_i^t = 1$. We shall make the distinction between the state $s_i^t \in \{0, 1\}$ of a node, and the variable $v_i^t \in \{0, 1\}$ signaling whether node n_i is being actively contaminated by an external source in time t . In other words $v_i^t = 1$ marks node n_i at time t as origin of the contamination.
- **deterministic:** we will suppose all real parameters of the system (head pressures, drag coefficients, pipe lengths, demand flow, etc) as known in detail and fixed in time, such that the system operates in stationary regime. Stationarity was assumed for simplicity, but is not essential to our method, and can be readily lifted.
- **WDN is a graph:** any water distribution network is representable as a directed, non cyclic graph with timed edges $G(V, E, \Delta)$:
 - $V = \{n_i | i \in [0, 1, \dots, N]\}$ is the set of all nodes (vertexes) in the graph,
 - $E = \{(n_i, n_j)\}$ is the set of directed $n_i \rightarrow n_j$ edges with time delay Δ_{ij}
 - Δ_{ij} is the time delay of each pipe. When $(n_i, n_j) \in E$, $\Delta_{ij} > 0$ and $\Delta_{ji} = -\Delta_{ij}$. If $(n_j, n_i) \notin E$ then $\Delta_{ij} = \infty$.

In practice the graph $G(V, E, \Delta)$ is constructed using the topological network data (which nodes are joined by pipes). But this is not enough. We also need the stationary solutions of the Todini-Pilati equations, since we need the time Δ_{ij} the fluid takes to travel through pipe (n_i, n_j) that depends on the velocities of the fluid. In this sense, $G(V, E, \Delta_{ij})$ summarizes topological as well as dynamical information of our system.

II.1. Simplified dynamics for direct problem

The forward in time evolution of contaminants in the network is ruled by the following consistency equation between the state of node n_i and the states of it's predecessors $\partial^+ j = \{n_j | (n_j, n_i) \in E\}$:

$$s_i^t = m(s_{\partial^+ i}^{t-\Delta}, v_i^t) \equiv v_i^t \bigvee_{j \in \partial^+ i} s_j^{t-\Delta_{ji}} \quad (2)$$

The meaning of this equation is quite obvious. The node n_i at time t can be contaminated ($s_i^t = 1$) if either it is the origin of the contamination ($v_i^t = 1$) or it is receiving contaminants from nodes connected to it $\exists_{j \in \partial^+ i} s_j^{t-\Delta_{ji}} = 1$.

II.2. Graph-time expansion

Equation (2) suggests that the dynamics of contamination can be described in a time-extended graph, where nodes s_i^t are not only defined by their spatial location i in the WDN but also by a (discrete) time index t , where we define directed edges to be existent between nodes ($s_j^{t-\Delta_{ji}} \rightarrow s_i^t$) if a pipe connects node j with node i with a time delay of Δ_{ji} . In Figure 2 we show the first three time slices of the network of Figure 1. To avoid overloading the Figure, we only represented three edges, two of them connecting physical node 0 to physical node 5, in a $\Delta = 1$ time delay, and one connecting node 0 to node 2 in $\Delta = 2$ time steps.

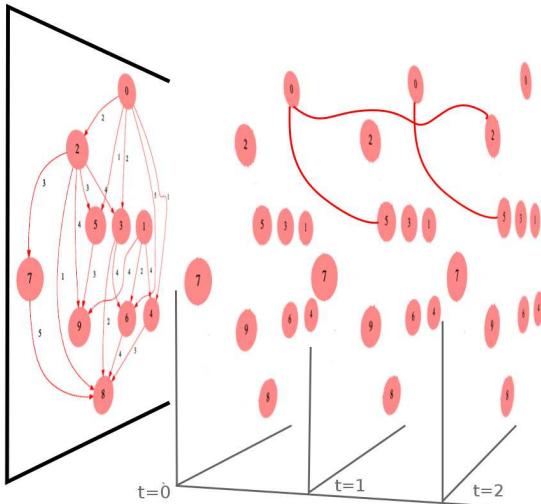


Figure 2. Representation of the time-extended graph derived from the graph in figure 1.

The time-extended graph will be the starting point of our construction, allowing us to simulate simplified dynamics through eq. (2). To test our inference procedure, we generate random graphs with the desired properties (directed, non cyclic and timed edges) pick up a random source node and a random pattern $v_i^t = (0, 0, 0, 1, 1, 0, 1, 1, 0, 0, \dots)$, and use equation (2) to track the evolution throughout the network. We will also pick, among the contaminated nodes, one or two that will be used as sensor, and whose evolution in time $s_o^t = (0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 0, 1, 1, \dots)$ will be accessible to the inference procedure that we explain next.

III. INFERENCE AS OPTIMIZATION PROBLEM

The inverse problem we want to solve can be stated as follows. Given a water distribution network, characterized by a graph $G(V, E, \Delta)$, and a set $O = \{o_1, o_2, \dots\}$ of observed nodes with their patterns $s_{o_i}^t = (0, 0, 0, 1, 1, \dots)$, find the most

probable set $P = \{p_1, p_2, \dots\}$ of nodes and their patterns $v_p^t = (0, 0, 1, 1, \dots)$ for the origin of the contaminants in the network. When convenient we will denote both, the observed nodes and the contamination patterns by O and P in each case.

In the estimation theory language, and using the Bayes formula, we want to maximize, over the set of origins P , the probability

$$Prob(P|O) = \frac{Prob(O|P)Prob(P)}{Prob(O)}.$$

To the scope of maximization, the denominator $P(O)$ is unknown but irrelevant. On the other hand, the probability of observing contamination O given a set of sources P

$$Prob(O|P) = \sum_{s_i^t \in O} \prod_i \prod_t \delta_{s_i^t, m(s_{\partial^+ i}^{t-\Delta}, v_i^t)}$$

is either one or zero, depending on whether the deterministic evolution of contamination in time following equation (2) reproduces or not the observed pattern. This is a consequence of the deterministic assumption made for the dynamics of the network.

Therefore, the maximum of $Prob(P|O) \propto Prob(O|P)Prob(P)$ is found among the origins that are consistent with the observation, that we will symbolize as $P \rightarrow O$. In other words, we will estimate the origin of the contamination as the set of nodes and patterns satisfying

$$\hat{P} = \operatorname{argmax}_{P: P \rightarrow O} Prob(P).$$

Now we need to fix a prior for the patterns. Assuming that the contamination is a rare event, we will consider as more probable the explanations requiring the smallest amount of nodes and time laps involved in the original contamination, therefore, the smallest set P .

Using equation (2) recursively, we can write the consistency equations between the observation at any node, and the original contamination variables v_i^t at nodes above it in the graph,

$$s_i^t = M(v_{\partial^{++}i}^{t-\Delta_c}, v_i^t) \equiv v_i^t \bigvee \bigvee_{j \in \partial^{++}i, c \in C_{ij}} v_j^{t-\Delta_c^+}. \quad (3)$$

The reason why this recursive substitution of eq. (2) in itself has an end point is that we are considering non cyclic networks, so the observation at node s_o^t can only come from a finite number of nodes and times in the graph. In expression (3), Δ_c^+ stands for the time delay of path c from node n_j to node n_i , while $\partial^{++}i$ stands for all nodes n_j that can access node n_i by some path c in graph $G(V, E, \Delta)$. The expression $v_{\partial^{++}i}^{t-\Delta_c^+}$ inside the definition of function $M(\cdot, \cdot)$ represents all element $v_j^{t-\Delta_c^+}$ on the right-hand side of the equation.

The condition $P \rightarrow O$, read as “origins $P = \{p_1, p_2, \dots\}$ causes observation O ” is equivalent to the condition

$$\forall_{o \in O} \forall_t s_o^t = M(v_{\partial^{++}o}^{t-\Delta_c}, v_o^t).$$

III.1. Graph reduction

As we want the smallest set P , any node that is not present on the right-hand side of this equation, will be assumed not to be an origin $v_i^t = 0$, since it is irrelevant to explain the observation. Furthermore, the nodes that do appear on the right hand side of one of these equations, but whose left-hand side is a clean observation $s_o^t = 0$, are forced by this equation to also be clean, $v_j^{t-\Delta_c^+} = 0$. Therefore, in order to explain the observation we remain with the observed nodes variables v_o^t that are seen as contaminated $s_o^t = 1$ and those $v_j^{t-\Delta_c^+}$ connected to them by equation (3) that are not connected to non contaminated observations. All this reduction of the valid nodes is equivalent to what is done in the contamination source pruning of [18].

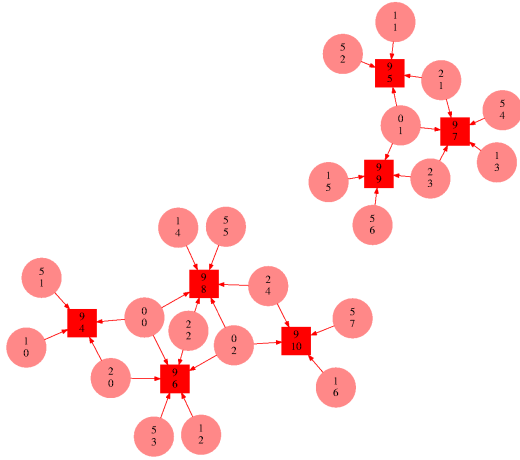


Figure 3. Each node is labeled by two numbers, the upper one is the original node number in the graph (Fig. 1) while the lower one stands for the time bin of the variable v_i^t it represents. Square nodes correspond to observed state variables v_o^t , while circular nodes correspond to the remaining variables (see text).

We can represent the relation between the remaining variables as a graph, in which each contaminated observed node variable v_o^t is connected to the non observed nodes that remained as possible explanations of the observed state, as in Figure 3. Furthermore, re-labeling the variables in this representation as y_k for the observed (square) nodes v_o^t and x_i for the non-observed (circular) nodes $v_j^{t-\Delta_c^+}$, the constraints imposed by eq. (3) can be stated as

$$\forall_{y_i \in Y} \quad y_i + \sum_{x_k \in \partial y_i} x_k \geq 1 \quad (4)$$

forcing each observed node itself, or one of its neighbors to be the origin of the contamination. The condition $\hat{P} = \operatorname{argmax}_{P: P \rightarrow O} \operatorname{Prob}(P)$ now can be rewrite as

$$(\hat{x}, \hat{y}) = \operatorname{argmin}_{x, y} \left(\sum_i x_i + \sum_j y_j \right) \quad (5)$$

under the constraints given by eq. (4).

Both, the objective function and the constraints are linear, and therefore susceptible of being solved by integer/linear programming methods (LP). Furthermore, since coefficients are integers, more than one optimal solution might exist. The set of all solutions can be found by recursively slightly altering the coefficients of the variables in the objective function (see [23]). Once a solution is known, we get a set of variables y and x with value 1, while the rest is zero. Mapping back y_k and x_i to the original variables v_o^t and v_j^t , we claim this solution to be an optimal pattern of contamination.

At this point it is important to clarify that the optimization made by LP is only in time, meaning that any two solution with the same number of active times for the contamination are equivalent. In other words, the optimization does not distinguish whether the source nodes of the time-extended graph correspond to the same node in the water network, or to different nodes. This is relevant, since the basic assumption made, namely that contamination is a rare event, would also imply that solutions with one real node of the water network might be preferable to those involving more nodes, even in the cases where the latter involves less time-expanded nodes. The current procedure can not solve this issue neatly. We partially circumvent it by choosing among the solutions those involving less real nodes of the water distribution network.

We have shown how to transform the inference of contamination into a treatable optimization problem. Let us outline the whole procedure here:

1. **Input:** Start from the given WDN and the set of pipe times obtained from the solution of the Todini-Pilati equations for your system, and some observed contamination pattern. (For this step one probably will use EPANET or other similar software, as we did for the network of Modena city. In the case of random networks, this step was not required, since the time intervals were directly generated from a probability distributions.)
2. **Graph-time expansion:** Using the speeds along the pipes, and the distances of the pipes, compute the time delays Δ_{ji} . Use a suitable discretization of the times to create a time-extended graph as explained in the previous section. (We programmed this step in *Python*.)
3. **Graph reduction:** Starting from the time-extended graph, create a new graph by connecting every node s_i^t to all other nodes s_k^t such that a path $(s_k^{t_k} \rightarrow s_{k1}^{t_{k1}}), (s_{k1}^{t_{k1}} \rightarrow s_{k2}^{t_{k2}}), \dots, (s_{kn}^{t_{kn}} \rightarrow s_i^t)$ exists. Reduce this graph (as in Figure 3) by retaining only the observed contaminated nodes and those connected to them that could possibly explain the contamination. (We programmed this step in *Python*)
4. **Optimization:** Use linear programming to find the most efficient explanation for the contamination observed. (We used *lpsolve* solver in Linux)

Next we discuss two typical situations where our method fails and succeeds. In the section after, we test the efficiency in three different situations: many unrealistic random topologies water distribution networks, a real city (Modena in Italy) and finally many realistic random cities statistically similar to Modena.

IV. SIMPLE SMALL EXAMPLES

Let us consider two separate examples, using the toy network of Figure 1. The first example is the observation of a contamination at sensed node 7 (bottom left, painted in blue color), with pattern $s_7 = (0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 1, 0, 0)$. Given that there is only one path in the network arriving at node 7, it is obvious that contamination should have happened along that path, this is, either at 7 itself, at node 2, at node 0, or at a combination of them. Our algorithm (and logic) will produce the following solutions (only representing the non zero nodes):

$$S = \{(v_7^5, v_7^8), (v_2^2, v_2^5), (v_0^0, v_0^3), (v_7^5, v_2^5), (v_7^5, v_1^3), (v_2^2, v_7^8), (v_2^2, v_1^3), (v_1^0, v_2^5), (v_1^0, v_7^8)\}$$

While all those solutions involve two nodes of the time-extended graph and are equivalent to our optimization code, only the first three involve one real node of the WDN. We call this solutions 1-node-solutions. Assuming that contamination is a rare event, we will select the subset of 1-node-solutions, whenever it is not empty, as the most probable contamination source. In this case, however, neither the algorithm nor logic can reduce our uncertainty among which of the three nodes (7, 2, 0) was the most probable origin. This is a difficulty that arise also in many other contamination inference algorithms [10, 13, 16, 19].

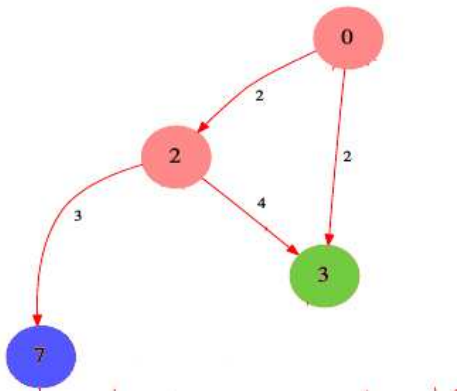


Figure 4. Part of Graph from figure 1. Blue (node 7, bottom left) and green (node 3, bottom right) nodes are those where two different contamination events are sensed.

The second example is the observation of a contamination at sensed node 3 (bottom right, painted in green color), with pattern $s_3 = (0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 1, 0)$. Now there are two paths in the network arriving at node 3. As before, we can

explain the contamination with single node solutions as

$$S = \{(v_0^3), (v_2^1, v_2^5), (v_3^5, v_3^9)\}$$

The outcome of our algorithm, however, will be only (v_0^3) , since it minimizes the number of nodes in the time extended graph required to explain the contamination effect. This illustrates both, the power and the risk of our algorithm. We expect our optimization procedure to return non-trivial inference whenever there is more than one path connecting the real contamination source with the observation nodes. At the same time, complex in time patterns (with contamination lasting for more than one time interval) are susceptible of being over-simplified. That would be the case of the previous example, if the real contamination origin had been node 2, a situation that our algorithm would disregard as sub-optimal.

We could study mathematically the probability of such situations appearing in water distribution networks, but we leave this for a future study on the optimal sensor distribution. For the optimality of sensor placement, exploiting multi-path will be crucial. We next characterize “experimentally” our method by trying it on many artificial networks.

V. RANDOM DISTRIBUTION NETWORKS

In the following we will only treat contaminations events that take place in a single node of the network. Therefore if the true contamination patterns is a solution of our optimization problem, then it is in the 1-node-solutions. Despite already being a reduction, the 1-node-solutions can contain many different explanations for our contamination. For instance if we have a WDN that is simply a single chain of nodes with water moving along, and a sensor at the end of it, the method will find all nodes in this line are equally good 1-node explanations of the observed pattern.

We define the efficiency of our method in two different ways. First, by the probability of finding the real contamination pattern in the 1-node-solutions. Second, by the probability that the real contamination pattern is one randomly selected 1-node solution. This second measure is more demanding, since in order to be efficient, the method should find few optimal solutions, while the first measure is insensitive to the multiplicity of solutions.

To explore the efficiency of the method we first test it on random graphs with WDN characteristics. These random graphs (as the one in figure. 1) are Erdos-Renyi graphs [24] in which a directionality and a time delay are enforced in each pipe. Figure 5 shows the efficiency of the method versus the number of nodes in the system. The origin of the contamination is taken to be a single randomly selected node i , and we spread from it a compact contamination pattern (contamination in consecutive times steps, lasting a randomly selected time between 2 and 10) at $t = 0$ $v_i = (1, 1, 1, 0, \dots)$. The selection of sensors is made in the following way: the sensed node is picked randomly from the set of nodes touched by the contamination but guaranteeing that is not connected with previously chosen sensors (because

in this case the contamination in one of them can explain the contamination in the other). If this condition can not be satisfied, then the second sensor is picked randomly from the nodes through which contamination does not pass (the information of a node not being contaminated is also informative, since it allows the removal of all its neighbors from the set of possible explanations).

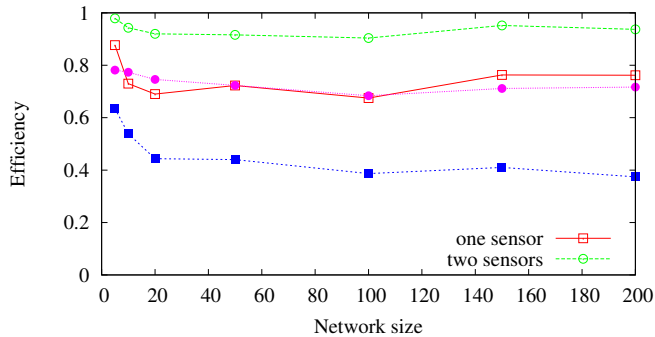


Figure 5. Efficiency of the inference method with one and two sensors in a system with a compact contamination pattern. Squares correspond to one sensor cases, while circles correspond to two sensors. Open points correspond to the first efficiency measure, while the full points correspond to the second (see first paragraph in this section). Each data point is an average of 1000 different contamination events in different systems.

We could have done simulations for bigger graphs, but the trend seems already to be stable in the range 20 – 200. Let us underline that 200 nodes is already a size comparable to that of small cities, or at least of some industries. However, we did not push forward in this direction, since an Erdos-Renyi random graph is hardly a credible topology for real water distribution networks (see Modena and Modena-like random cities in the next sections).

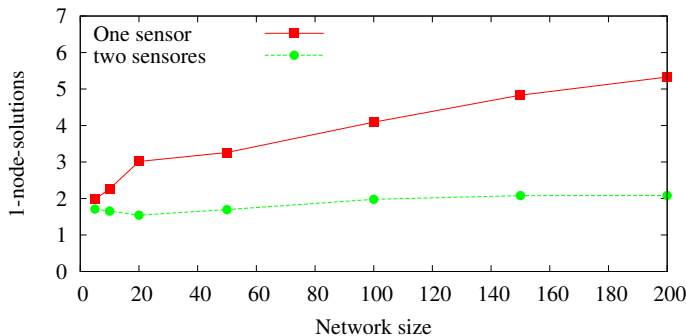


Figure 6. Comparison between the number of solutions which involved only one node of the Graph G with one or two sensors in the system. Each data point is an average of 1000 different contamination events on different systems.

The efficiency practically remains constant for 50 or more nodes. With two sensors in the system the method is nearly perfect since practically in every case of study the real contamination pattern was obtained among the optimal solutions found. However, in both cases, the inference method finds many 1-node solutions for the optimization problem, reducing the second efficiency measure.

In any case the number of solutions found by the method

is also a relevant parameter to characterize its efficiency. As we mentioned at the end of Section III the method can not determine the solutions which involve less number of nodes the real water distribution network (graph G) directly from optimization (5), but rather those involving less nodes of the time-extended graph. Given a set of optimal solutions we can further reduce this set by selecting among them those involving fewer real nodes in the network. In Figure 6 we show the number of optimal solutions which involve only one real node of Graph G .

Observe that the number of 1-node-solutions is never higher than ten, this means that with one sensor in a network of 200 nodes the number of nodes which are possible source of the contamination are around 10, which is significantly smaller than the network size, but still not a reliable estimation method. However, with two sensors the average number of optimal solutions is between 1 and 2, which is quite a reduction of the uncertainty.

VI. MODENA CITY

To get more realistic, we studied a real city network: the one of Modena, Italy. As can be seen in the top-left panel of Figure 3, real cities are far from being random E-R graphs, since they are mostly planar graphs. We took Modena topology as well as pressure and demand data from the Internet [25], and used EPANET to solve the stationary state of the network. With the resulting fluid velocities in pipes, we computed the delay times in each network pipe using a discretization of 30 seconds, which is smaller than the fastest pipe (41 seconds), and much smaller than the average pipe delay (~ 1100 seconds, more than 30 times the discretization). Then we constructed our abstract graph representing the city and studied many contamination events on random locations.

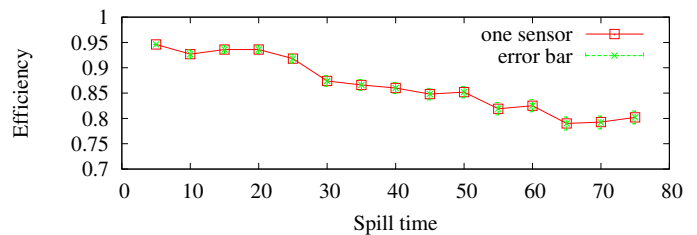


Figure 7. Efficiency of the method as a function of the duration of the contamination event. The time units is 30 seconds, so the largest spill time considered is 37.5 minutes.

We cannot make an efficiency *vs* size study, since the size of the network is fixed to 268 nodes, but we can study the efficiency with respect to the duration of the source contamination. Notice in Figure 7 that for the range from 1 to 75 discrete time intervals, the efficiency remains above 75% . It seems to be a decreasing function of the contamination time. This is consistent with the fact that the proposed optimization method relies on the assumption that contamination is a rare event. This also suggest that a rule of thumb for assuming a good discretization of time is one that is smaller, but not many times smaller than the typical

duration of a contamination event. Of course, the meaning of “typical” here will be case specific.

VII. RANDOM MODENA-LIKE CITIES

We would also like to have statistic results over many different city networks. However, information about the water distribution network of real cities is normally restricted for security reasons. Specially since September 11th terrorists attacks, there has been a growing concern on concealing information that could be used to plan terrorist acts with the highest impact. Unfortunately, such comprehensible precaution affects the testability of studies like this, intended to protect citizens from intentional and non intentional contamination diffusion.

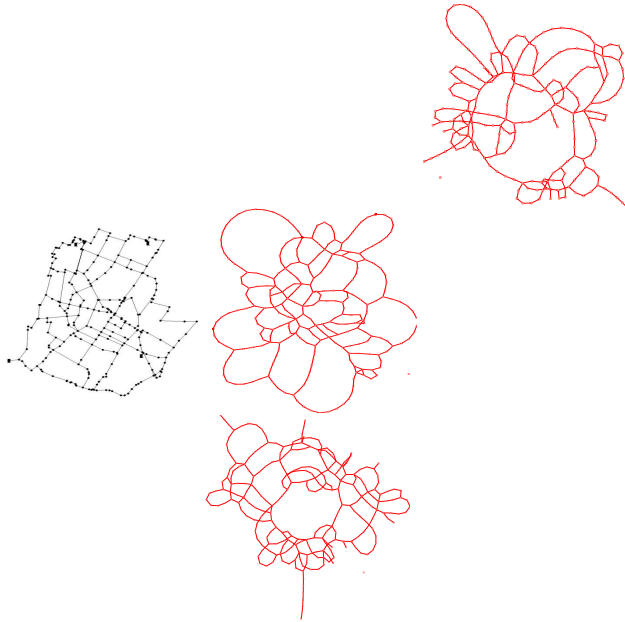


Figure 8. Modena and Modena-Like graphs in different views. 1. Graph of Modena city created with EPANET. 2. Graph of Modena city in a different view. 3,4 Graphs of Modena-Like cities.

To tackle this we devised a plausible algorithm to create random planar graphs similar to Modena. We start by a square 2D lattice graph of smaller size than Modena. Then we randomize the graph by the following two steps:

1. (add nodes) take randomly some edge (s_i, s_j) and replace it by a new node s_k and two new edges (s_i, s_k) and (s_k, s_j) . Do this until you end up with a number of nodes similar to that in Modena.
2. (remove edges) take randomly some edges of the graph and remove them.

The process is fine-tuned to achieve a similar number of nodes as well as degree distribution as that observed in Modena. The fraction of new nodes introduced to achieve a degree distribution as in Modena is then kept fixed when producing bigger or smaller sizes of networks. Both steps proposed will preserve the planarity of the original 2D lattice.

In Figure 8 you can see the similarity between Modena and our random versions of it. The top-left panel represents the real topology of the Modena network, while the top-right one is also Modena, but plotted with a standard graph plotting software. The lower panels are random Modena-like cities produced as explained before.

After creating the artificial Modena-like topology, we randomly assign a rank of pressures to the nodes, and give orientation to the fluid in each pipe accordingly. In the resulting model, we apply a contamination of typical time duration 10 time units to a random node and evolve it forward in time. Then we try to infer its origin with our optimization method taking the observation at one other random point of the system among those that are touched by the contamination.

With only one sensor, in sizes from 50 to 500 nodes we found that the correct contamination origin was found among the optimal solutions nearly every time (99%). However, the true solution is not the only one given by the algorithm. In the case with one sensor due to the low connectivity of real networks, and specifically in Modena and Modena-like networks, our method finds many optimal solutions, since almost each time the source and the sensed node are connected by a single path.

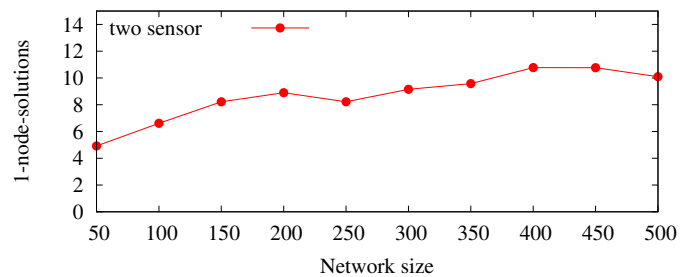


Figure 9. Number of solutions which involve only one node from Graph G in Modena-like networks with 2 sensors. Each data point is an average of 1000 different contamination events in different systems.

With two sensors, again, the method finds the true contamination pattern almost every time. In Figure 9 we show the number of optimal 1-node solutions found, but “normalizing” it. As we mentioned, when we have a single line of nodes the method can not distinguish which among them is the most probable source of contamination. For this reason, we decided to remove from the networks those nodes that have only two neighbors, and replace both pipes by an equivalent larger pipe. The number of 1-node solutions of this reduced version of the network are shown in Figure 9.

From the analysis of Modena and Modena like cities, we should emphasize that the method is good at finding the true origin among the solutions, but bad at reducing the number of equivalently good solutions. The multiplicity of optimal solutions is inevitable when the sensor node and the true origin of the contamination are connected by a single path. Let us underline, however, that we are testing our method in random settings, while in real life we expect the positioning of the sensors to have been carefully optimized to reduce the chances of multiple solutions.

VIII. CONCLUSIONS

In this paper we have presented a method to infer the contamination sources in fluid networks. The method relies in the plausible assumption that contamination events are rare. The inference was formulated in a Bayesian approach and it was transformed into a linear optimization problem with linear restrictions which can be solved using linear programming methods. We emphasize that the Bayesian step is used to formally derive an optimization problem, and not for the treatment of uncertainty in the network parameters (like flow, pipe diameters, etc) as has been done before. Through the simulation of many random events of contamination in random cities, Modena city and Modena-like cities, it was possible to determine the efficiency of the method (above 70 %), proving the method useful.

The method proposed could be readily extended to the case of non stationary states in the network. If the velocities in the pipes are changing with the demand during the day, for instance, it is not a problem to apply the procedure described to this case. It suffices to create the extended graphs connecting time-space nodes according to the time of the day each node represents.

However, the method is too simplistic in many aspects, some of which could be improved. Time discretization is one simplification, but is among those we would rather keep in future treatments. Binary contamination, however, seems a stronger simplification, since a lot of information could be present in the intensity pattern. To keep in the realm of discrete optimization problems, an improvement could be achieved by having more than two discrete contamination levels.

Furthermore, we consider that the main drawback of the method for its applicability, is its rigidity. Contamination could pass undetected by observation nodes, specially if highly diluted. In the current setting, any observed non-contaminated time-space node, implies the definite elimination of all the upstream nodes as possible origins. We have seen that when using our method with EPANET realistic diffusion, this implies losing the real sources many times. We think that the best improvement over the current method will come from applying stochastic methods of inference, like Bayesian networks, to the problem. We are currently moving in this direction.

REFERENCES

- [1] F. Altarelli, A. Braunstein, L. Dall'Asta, A. Lage-Castellanos, R. Zecchina, *Phys. Rev. Lett.* 112, 118701 (2014).
- [2] W. Luo, W. P. Tay and M. Leng, *IEEE J. Sel. Top. Signal.* 61, 2850 (2013).
- [3] Ch. Milling, C. Caramanis, Sh. Mannor and S. Shakkottai, 2012, 50th Annual Allerton Conference on Communication, Control, and Computing (Allerton) (2012).
- [4] B. M. Spinelli, LCA3, I&C, EPFL (2009).
- [5] K. Zhu, and L. Ying, *Information Theory and Applications Workshop* (2013).
- [6] W. Luo, W. P. Tay and M. Leng, *IEEE T. Signal. Proces.* 61, 2850 (2014).
- [7] A. Y. Lokhov, M. Mézard, H. Ohta and L. Zdeborová, *Phys. Rev. E* 90, 012801 (2014).
- [8] J. Jiang, *IEEE Commun. Surv. Tut.* 19, 465 (2017).
- [9] I. Butera, F. Boano, R. Revelli and L. Ridolfi, *J. Water. Res. Pl.* 139, 418 (2012).
- [10] A. Preis and A. Ostfeld, *J. Water. Res. Pl.* 132, 263 (2006).
- [11] L. Perelman and A. Ostfeld, *In Water Distribution Systems Analysis* 426 (2010).
- [12] C. D. Cristo and A. Leopardi, *A. J. Water. Res. Pl.* 134, 197 (2008).
- [13] J. J. Huang and E. A. McBean, *J. Water. Res. Pl.* 135, 466 (2009).
- [14] Ch. Hu, J. Zhao, X. Yan, D. Zeng and S. Guo, *Ad Hoc Netw.* 35, 116 (2015).
- [15] J. Guan, M. M. Aral, M. L. Maslia, W. M. and Grayman, *J. Water. Res. Pl.* 132, 252 (2006).
- [16] T. Tao and Y-j. Lu, X. Fu and K-l. Xin, *J. Zhejiang. Univ-SC.A.* 13, 559 (2012).
- [17] H. Wang and K. W. Harrison, *J. Water. Res. Pl.* 139, 13 (2011).
- [18] M. Propato, F. Sarrazy, M. and Tryby, *J. Water. Res. Pl.* 136, 483 (2009).
- [19] E. Salomons and A. Ostfeld, Identification of possible contamination sources using reverse hydraulic simulation, 12th Annual International Symposium on Water Distribution Systems Analysis, Tucson, Arizona, USA, published on CD, (2010).
- [20] E. Todini and S. Pilati, *Computer applications in water supply: vol. 1—systems analysis and simulation* (Research Studies Press Ltd., 1988).
- [21] O. Giustolisi, D. Laucelli and A. F. Colombo, *J. Water. Res. Pl.* 135, 117 (2009).
- [22] L. A. Rossman, *EPANET 2: users manual*. (US Environmental Protection Agency. Office of Research and Development. National Risk Management Research Laboratory 2000).
- [23] E. Ortega, "Diploma Thesis", Physics Faculty, University of Havana, 2015.
- [24] P. Erdos and A. Rényi, *Publ. Math. Debrecen.* 6, 290 (1959).
- [25] University of Exeter, Free Modena EPANET model. <http://emps.exeter.ac.uk/media/universityofexeter/emps/research/cws/downloads/data/3-epanet/MOD.inp>. (2014).

ANGLE-RESOLVED X-RAY PHOTOELECTRON SPECTROSCOPY STUDY OF THE THIOUREA DERIVATIVE ADSORPTION ON Au(111) FROM ETHANOLIC SOLUTION

ESTUDIO DE LA ADSORCIÓN SOBRE Au(111) DE UN DERIVADO DE TIOUREA EN DISOLUCIÓN ETANÓLICA MEDIANTE ESPECTROSCOPIA DE ELECTRONES

M.P. HERNÁNDEZ^{a†}, G. NAVARRO-MARÍN^a, O. ESTÉVEZ-HERNÁNDEZ^a, M.H. FARÍAS SÁNCHEZ^b

a) Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, Zapata y G, El Vedado, Plaza de la Revolución, La Habana 10400, Cuba; mayrap@imre.uh.cu[†]

b) Centro de Nanociencias y Nanotecnología (CNYN), Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), km 107 Carretera Tijuana-Ensenada, Ensenada, Baja California, 22860, México

[†] corresponding author

Recibido 20/3/2017; Aceptado 21/7/2017

The adsorption of 1-(2-Furoyl)-3-[3-(trifluoromethyl)phenyl] thiourea on Au(111) from ethanolic solution, was studied by means of angle-resolved X-ray photoelectron spectroscopy (ARXPS). The AR-XPS spectra were obtained at different take-off angles with respect to substrate surface: (50°, 70°, 90° and 110°). The spectra of the C1s at different take-off angles indicated the degradation of the CF₃ in CF₂ and CF entities. This degradation is due to damages provoked for the effect of the electrons induced by X-ray excitation. High resolution spectra of F1s at these angles, showed two peaks at 687.6 and 688.4 eV, confirming the presence of the organic fluorine (-F-C-) and inorganic fluoride (F⁻). The X-ray-photoelectron angular measurements were capable of yielding thickness-to-mean free path ratios for the adsorbed layer. Despite of the fluorine lost, such measurements demonstrate the permanence of the CF₃ groups in the meta-phenyl position at 10±1 Å of the inorganic fluoride. A preferential orientation of the species (CF_{x=1,2,3}) at 50° respect to the substrate's surface was observed.

La adsorción de 1-(2-Furoil)-3-[3-(trifluorometil)fenil]tiourea sobre Au(111) en una disolución etanólica, se estudió mediante la distribución angular de fotoelectrones de rayos X (AR-XPS). Los espectros de AR-XPS se obtuvieron a diferentes ángulos de detección con respecto a la superficie del sustrato: 50°, 70°, 90° y 110°. En los espectros angulares de C1s se observa la degradación del grupo CF₃ en las especies CF₂ y CF. Esta degradación es provocada por el efecto de los electrones inducidos por la excitación de los rayos X. Los espectros de alta resolución de F1s en estos ángulos, mostraron dos picos a 687,6 y 688,4 eV, confirmando la presencia de flúor orgánico (-F-C-) y flúor inorgánico (F⁻). Las mediciones angulares de fotoelectrones permitieron determinar la relación entre el espesor de la capa de moléculas y el recorrido libre medio de los electrones en la capa adsorbida. A pesar de las pérdidas de flúor, tales mediciones demostraron que los grupos CF₃ permanecen en la posición meta del anillo bencénico a una distancia 10±1 Å del flúor inorgánico. Las especies (CF_{x=1,2,3}) mostraron una orientación preferencial a 50° respecto a la superficie del sustrato.

PACS: Auger spectroscopy, 82.80.Pv; Electron beam radiation effects, 61.80.Fe; Physisorption, 68.43.-h

I. INTRODUCTION

Clarifying the nature of interactions between metal electrodes and organic molecules still represents one of the challenging problems in molecular electronics that needs to be solved in order to optimize electron transport through a molecular device.

Photoemission is an ideal technique to provide information about the electronic structure of surfaces [1–3]. X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) determines the elemental composition of a surface, including quantification and also with chemical bonding information. Another utilization of XPS is to analyze separately parts from a single molecule, in order to discriminate them. XPS has this potential because of its nanometric probing depth. This capability is used to find a certain functional group of interest in a molecule specifically appearing on the outermost surface and giving it special kinds of properties. The angular distribution of photoelectrons is used to understand the relation between

the functionality of the surface structure and the transfer property of a particular single molecule.

One also can determine the absolute value of the photoelectron mean free path. Thiourea derivatives are versatile compounds with several electronic centers. The reports about adsorption on gold surface of this kind of molecules is scarce. Previous studies has been focused mainly on simple thiourea using Voltammetry and Electrochemical Scanning Tunneling Microscopy (EC-STM). We here report the adsorption of the thiourea derivative 1-(2-Furoyl)-3-[3-(trifluoromethyl) phenyl] thiourea on Au(111). It was studied by means XPS. This molecule contains a 2-furoyl group on one side of the thiourea moiety and a 3-monosubstituted phenyl group on the other side. The electronic properties of these compounds can be affected by the type of substituent and its position, resulting in the variation of the spatial configurations, which have important effects on the electronic properties. The investigation of the electronic properties of this molecular-metal junction may

lead to the development of new molecular systems composed by these single-molecules with application in heavy metal sensors.

This paper demonstrates the degradation of the CF₃ substituent to CF₂ and CF species by monitoring spectral changes on the C1s transition from 1-(2-Furoyl)-3-[3-(trifluoromethyl)phenyl] thiourea molecule (C₁₃H₉F₃N₂O₂S) (Figure 1). Additionally, the angular distribution of the photoelectrons of the F1s made possible to determine the distance between -F-C- and F⁻ entities.

II. EXPERIMENTAL DETAILS

II.1. C₁₃H₉F₃N₂O₂S synthesis

The C₁₃H₉F₃N₂O₂S molecule was prepared according to a previous procedure by Otazo et al [4]. Gold substrates were supplied by Arrandee.

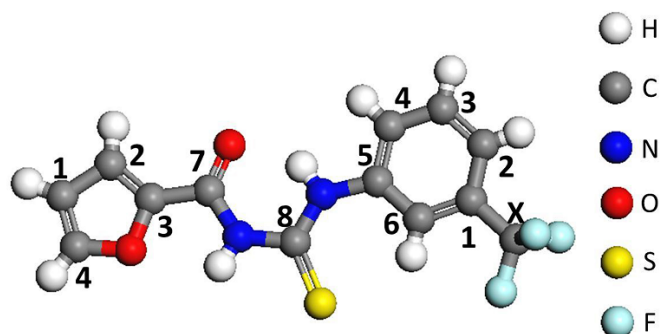


Figure 1. Scheme of the C₁₃H₉F₃N₂O₂S molecule.

II.2. Preparation of the C₁₃H₉F₃N₂O₂S molecule on Au(111)

50 mg of the C₁₃H₉F₃N₂O₂S molecule were dissolved in 5 ml of ethanol. The gold substrate was annealed in butane flame for 3 min to produce flat terraces with a (111) preferred orientation. The substrate was immersed in the ethanolic solution during 24 h at room temperature. Later, it was rinsed with abundant deionized water and dried under a N₂ stream.

II.3. Spectroscopic analysis

XPS and AR-XPS spectra were collected on a SPECS custom-made system using a PHOIBOS 150 WAL hemispherical analyzer and a monochromatized Al K_α line (1486.6 eV) from μ-FOCUS 500 X-ray monochromator. A two-point calibration of the energy scale was performed by using gold (Au 4f_{7/2}), binding energy at 84.0 eV and copper (Cu 2p_{3/2}), binding energy at 932.7 eV. Au 4f_{7/2} at 84.0 eV was used as the energy reference in order to subtract charging shifts. Shirley-type background was subtracted from each high resolution spectrum. The best fit with the experimental values was a combination of Gaussian/Lorentzian functions (Gaussian/Lorentzian ratio of 70/30). Measurements were performed at different takeoff angles (θ = 50°, 70°, 90° and 110°) with respect to surface.

II.4. ANALYSIS PROCEDURE

The photoelectron intensity from a thin film-covered substrate varies with the take-off angle, θ, as given by [5]

$$\ln(I) = -\frac{d}{\lambda \sin(\theta)} + \ln(I_0), \quad (1)$$

where I₀ and I are the intensities of the photoelectrons from clean substrate and from substrate covered with a thin film of thickness d, respectively, and λ is the photoelectron mean free path. According to 1, ln I should be linearly related to 1/sin θ with the slope of -d/λ. Kondo *et al.* proposed the following equation to calculate d (in Å) for organic thin films [6]

$$-\frac{d}{\lambda} = d \frac{E_p^2}{E_k} \left[\beta \ln \left(0.191 \frac{E_k}{\lambda d^{0.5}} \right) - \frac{1634 - 0.91 E_p}{829.4 E_k} + \frac{4429 - 20.8 E_p}{829.4 E_k^2} \right] \quad (2)$$

where E_k (eV) is the kinetic energy of the photoelectron, E_p (eV) is the free electron plasmon energy and β is an empirical parameter. E_p and β are given by following two equations:

$$E_p = 28.8 \sqrt{\frac{N_v \rho(d)}{M}}, \quad (3)$$

$$\beta = -0.10 + 0.944(E_p^2 + E_g^2)^{-0.5} + 0.069 \rho(d)^{0.1}, \quad (4)$$

being M and N_v the molecular weight and the number of valence electrons of the overlayer molecule, respectively.

In the case of a monolayer formed by adsorbed molecules on surface, ρ can be used as:

$$\rho(d) = \frac{\Gamma M}{N_A d}, \quad (5)$$

where Γ is the adsorbed amount of molecules on the substrate (molecules cm⁻²) and N_A is Avogadro's number.

Taking into account these equations, (d/λ) can be determined from the AR-XPS measurement, the slope of the plot of ln I versus 1/sin θ, as shown in 1, and Γ can be electrochemically determined by measuring the charge of the reductive desorption in a basic solution [7], then, d will be the solution of the equation (2).

III. DISCUSSION

Figure 2 presents the S 2p XPS spectra. It shows a broad peak with pronounced asymmetry toward larger binding energies. The solid line in Figure 2 is the best fit to the cumulative spectrum with two species. The sulfur species obtained by this fit were S 2p_{3/2} with binding energies at 161.8±0.2 and 163.6±0.2 eV. The S 2p binding energies of sulfur are characteristic of the molecular structure and are predominantly determined by the electronegativities of nearest-neighbor atoms. The lower binding energy at 161.8 eV corresponds to thiourea adsorbed. It is assigned by comparing with previously published S 2p reference peaks

[8]. In the case of the minority sulfur species at 163.6 eV, various assignments are possible i.e., sulfur adsorbed either as multilayers and/or thioureas multilayers.

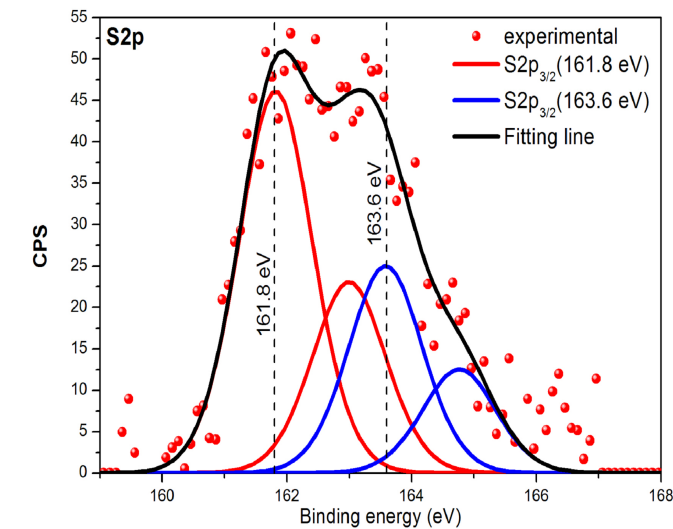


Figure 2. S2p spectra of C₁₃H₉F₃N₂O₂S at high intensity normal (HIM).

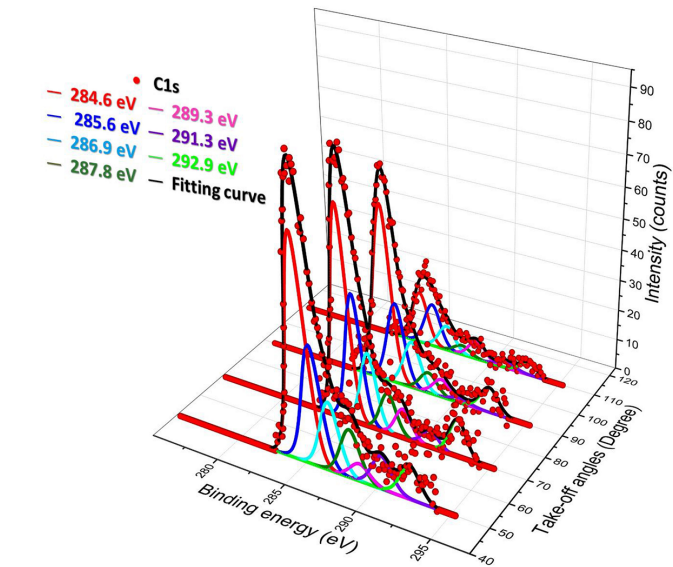


Figure 3. C_{1s} AR-XPS spectra of C₁₃H₉F₃N₂O₂S at different emission angles

Figures 3 and 4 show C_{1s} and F_{1s} spectra of the C₁₃H₉F₃N₂O₂S on Au(111) detected at various angles θ . The C_{1s} spectra can be deconvoluted into component 1 at 284.6 eV (C-C for hydrocarbon and C_i, $i = 1, 2$ for furoyl), component 2 at 285.6 eV (C_i, $i = 3, 4, 5$ for phenyl), component 3 at 286.9 eV (C_i, $i = 1, 2, 6$ for phenyl and C_i, $i = 3, 4$ for furoyl), component 4 at 287.8 eV (C=O), component 5 at 289.3 eV (C-F), component 6 at 291.3 eV (-CF₂) and component 7 at 292.9 eV (-CF₃). The F_{1s} components 1 at 687.4 eV (F⁻) and 2 at 688.4 eV (C-F) were determined by peak component fitting. The (F⁻) ion is expected to be adsorbed on gold. F_{1s} and C_{1s} binding energies (eV) are summarized in Table 1.

By applying equations (2)-(5) to F_{1s} spectra, we can estimate the distance between organic fluorine (CF_{*i*}, $i = 1, 2, 3$) and inorganic fluoride adsorbed on gold (Au-F). The values employed in the calculation were as follows: $-d_{\text{organic fluorine}}/\lambda = -4.9$ and $-d_{\text{organic fluorine}}/\lambda = -5.2$, obtained as the slope of the $\ln I$ versus $(\sin \theta)^{-1}$, $\Gamma = 1.25 \times 10^{15}$ molecules·cm² [16], $M = 314$ g·mol⁻¹ (C₁₃H₉F₃N₂O₂S), $N_v=117$ (C=13,H=9,F=3,N=2,O=2) and $E_g = 4.75$ eV [17], which is edge energy in the absorption spectra of benzene [14]. The $E_K=798.2$ eV for (-FC-) and $E_K=799$ eV for (F⁻), were calculated by subtracting the binding energy of the F_{1s} for organic fluorine (688.4 eV) and inorganic fluoride (687.6 eV) from incident X-ray energy of 1486.6 eV. The chosen E_g for benzene may lead to some error, since the surface layer consists not only of the benzene group. However, this error must be small due to the value of E_g does not significantly affect to β value, because E_p is larger than E_g (see 2, 4). The value of the $d_{\text{organic fluorine}} - d_{\text{inorganic fluorine}}$ is $\approx 10 \pm 1$ Å and $\lambda = 30 \pm 1$ Å for both, -F-C- and F⁻ entities.

Table 1. C_{1s} and F_{1s} binding energies (BE) in eV for C₁₃H₉F₃N₂O₂S on Au(111).

C _{1s}	BE (eV)	BE (eV)	Reference
	this work	reported	
C-C	284.6	284.6	[9]
C _{1fu} , C _{2fu}		284.8	[10]
C _{4ph}	285.6	285.5	[11]
C _{3ph} , C _{5ph}		286	
C _{2ph} , C _{6ph}	286.9	286.5	[11]
C _{3fu} , C _{4fu}		286.6	[10]
C _{1ph}		286.9	[11]
C ₇	287.8	287.7	[12]
>C=S		288.1	[13]
X=CF	289.3	288.9	[12]
X=CF ₂	291.3	291.3	[14]
X=CF ₃	292.9	292.9	[12]
F _{1s}			
C-F	688.4	688.8	[14]
Au-F	687.4	687.6	[15]
*fu=furoyl			
**ph=phenyl			

Table 2. Experimental C/F areas ratio at different take-off angles for C₁₃H₉F₃N₂O₂S on Au(111).

take-off angles (deg)	A _{C1} +A _{C2} +A _{C3} (counts·eV)	A _F (counts·eV)	Relative areas
50	47.8	67.5	0.708
70	33.6	91.5	0.367
90	23.5	64.0	0.367
110	20.7	70.0	0.297
A*=peak area			

The fluorocarbon species are associated with phenyl group, thus the distance between these groups and the substrate surface determine the relative position of the phenyl group in the molecule. An evaluation of the electrical properties in that spatial configuration will allow to choice a new design based on the substituent position in the phenyl ring.

Table 2 summarizes the relative peak areas ratio between the carbons and fluorine of the fluorocarbon species with the take-off angles. The quantification of spectra obtained at take-off angles of 70, 90, 110° showed a similar ratio between the components, but at 50° the relative amount of carbon increased slightly. Therefore, the only plausible reason for the increased carbon signal from the surface layer (Table 2) is a preferential orientation of the fluorocarbon species (CF_x groups) from the closer take-off angle to surface. Although we do not know exactly the distance of the bond sulfur-gold to the fluorocarbon species, an estimated length, taking into account to the bonding distances, is close to 13 Å. This fact along with a take-off angle of 50° allow us to determinate a fluorocarbon distance to the surface of 10 Å. This value is similar to that obtained for the distance between organic and inorganic fluoride confirming that at 50° the fluorocarbon species have a preferential orientation.

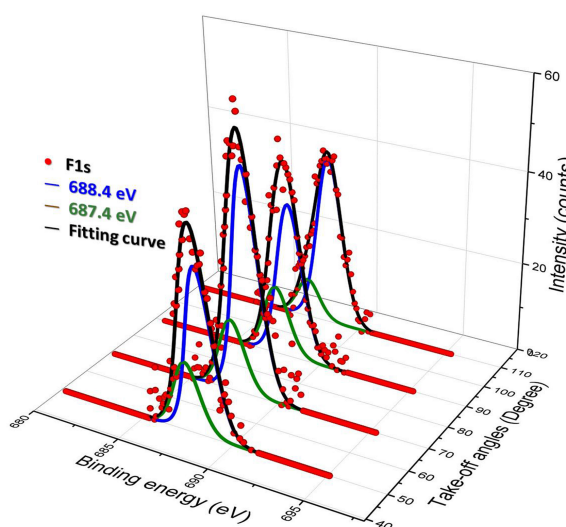


Figure 4. F_{1s} AR-XPS spectra of $\text{C}_{13}\text{H}_9\text{F}_3\text{N}_2\text{O}_2\text{S}$ different emission angles

IV. CONCLUSIONS

Chemical changes produced from the electrons induced by X-ray excitation include the partial transformation of CF_3 group by loss of fluorine in CF_2 and CF species. The component of F_{1s} at 687.4 eV corresponds to inorganic fluoride, which must be assigned to fluorine adsorbed on $\text{Au}(111)$. The distance between organic fluorine ($\text{CF}_{1,2,3}$ -meta-phenyl position) and the F atoms of Au-F is 10 ± 1 Å. The AR-XPS measurements permit a characterization of the specimen geometric parameters and surface compositions. Both spatial configuration and substituent's position modulate the electronic properties of the molecule-substrate system.

ACKNOWLEDGEMENTS

MPH acknowledges to DGAPA-UNAM for a 3-month fellowship through the "Programa de Estancias de Investigación en la UNAM (PREI)". The authors thank to David Díaz Domínguez for AR-XPS measurements. This study was partially supported by the Basic Science National Project (PNCB) Code: PNCB-49-UH-15.

REFERENCES

- [1] G. Mette, D. Sutter, Y. Gurdal, S. Schnidrig, B. Probst, M. Iannuzzi, J. Hutter, R. Alberto and J. Osterwalder, *Nanoscale* 8, 7958 (2016).
- [2] A. Szwajca, M. Krzywiecki and H. Koroniak, *J. Fluorine Chem.* 180, 248 (2015).
- [3] M. Nolan, S. D. Elliott, J. S. Mulley, R. A. Bennett, M. Basham and P. Mulheran, *Phys. Rev. B* 77, 235424 (2008).
- [4] E. Otazo-Sánchez, P. Ortiz-del-Toro, O. Estevez-Hernández, Pérez-Marín, I. Goicochea, A. Cerón-Beltrán and J.R. Villagomez-Ibarra, *Spectrochim. Acta A* 58, 2281 (2002).
- [5] C. S. Fadley, R. J. Baird, W. Siekhaus, T. Novakov and S. A. L. Bergstrom, *J. Electron Spectrosc.* 4, 93 (1974).
- [6] T. Kondo, M. Yanagida, K. Shimazu and K. Uosaki, *Langmuir* 14, 5656 (1998).
- [7] C. A. Widrig, C. Chung and M. D. Porter, *J. Electroanal. Chem.* 310, 335 (1991).
- [8] O. Azzaroni, G. Andreasen, B. Blum, R. C. Salvarezza and A. J. Arvia, *J. Phys. Chem. B* 104, 1395 (2000).
- [9] J. F. Moulder and W. F. Stickle, *Handbook X-Ray Photoelectron Spectroscopy*, 2nd Ed. (Physical Electronics Division, Perkin-Elmer Corporation, 1992), p. 41.
- [10] J. L. Solomon, R. J. Madix and J. Stöhr, *J. Chem. Phys.* 94, 4012 (1991).
- [11] D. T. Clark, D. Killcast and W. K. R. Musgrave, *J. Chem. Soc. Chem. Comm.* 1, 9 (1971).
- [12] D. Briggs and G. Beamson, *Anal. Chem.* 64, 1729 (1992).
- [13] R. Srinivasan and R.A. Walton, *Inorg. Chim. Acta* 25, L85 (1977).
- [14] F. Y. Zhang, S. G. Advani, A. K. Prasad, M. E. Boggs, S. P. Sullivan and T. P. Beebe, *Electrochim. Acta* 54, 4025 (2009).
- [15] A. Szwajca, M. Krzywiecki and Henryk Koroniak, *J. Fluorine Chem.* 180, 248 (2015).
- [16] A.E. Bolzan, R.C.V. Piatti, R.C. Salvarezza and A.J. Arvia, *J. Appl. Electrochem.* 32, 611 (2002).
- [17] S. L. Murov and I. Carmichael, *Handbook of Photochemistry*, 2nd Ed. (CRC Press 1993).

CÁLCULO DEL PARÁMETRO DE NO EXTENSIVIDAD EN EL MODELO DE INTERACCIÓN FRAGMENTO-ASPEREZA PARA LOS SISMOS DEL ECUADOR MEDIANTE UN MÉTODO BAYESIANO

COMPUTATION OF THE NONEXTENSIVITY PARAMETER IN THE FRAGMENT-ASPERITY MODEL FOR THE ECUADORIAN SEISMIC CATALOG BY A BAYESIAN APPROACH

S. ARAUJO^{a,b,†}

a) Universidad Politécnica Salesiana, Quito, Ecuador

b) Universidad Regional Amazónica Ikiam, Tena, Ecuador; jose.araujo@ikiam.edu.ec[†]

† autor para la correspondencia

Recibido 14/6/2017; Aceptado 25/9/2017

El presente artículo muestra la aplicación de la teoría de la interacción fragmento-aspereza al catálogo de sismos del Ecuador. Este catálogo contiene sismos generados por una subducción oblicua, por el movimiento de una astilla de placa y por varias fallas superficiales. En este escenario se calcula el parámetro de no extensividad q de la teoría y se lo compara con el de otras regiones. El valor de q para el Ecuador resulta en un valor mayor que para otros catálogos sísmicos. Se calcula el parámetro q de dos tipos de sismicidad originados en procesos físicos diferentes: los sismos superficiales y los sismos de profundidad intermedia. Se obtiene para estos últimos un valor de q ligeramente mayor que para los primeros. Un aporte esencial de este artículo es mostrar el cálculo del parámetro q mediante un algoritmo que resuelve el problema inverso desde una enfoque bayesiano.

This article shows the application the fragment-asperity interaction theory to the earthquakes catalog of Ecuador. This catalog contains earthquakes generated by an oblique subduction, by the movement of a sliver plate and by several shallow faults. In this scenario, the nonextensive q parameter of the theory is calculated and it is compared with other regions. The q parameter for Ecuador is higher than for other seismic catalogs. We compute the parameter q of two types of seismicity originated in different physical processes: shallow earthquakes and intermediate-depth earthquakes. For the latter, the value of q is slightly higher than for the former. An essential contribution of this article is to show the calculation of the q parameter by an algorithm that solves the inverse problem from a Bayesian approach.

PACS: Earthquakes, 91.30.Px; Inverse problems, 02.30.Zz; Entropy thermodynamics, 05.70.-a

I. INTRODUCCIÓN

La redefinición de la entropía propuesta por Constantino Tsallis [1] como una cantidad no extensiva, ha sido utilizada con éxito para dar un fundamento teórico a la ley Gutenberg-Richter de los sismos mediante el modelo de interacción fragmento-aspereza propuesto por Sotolongo-Costa y Posadas [2].

El modelo de Sotolongo-Costa y Posadas (S-P) hereda de la entropía de Tsallis el parámetro de no extensividad q que necesita ser determinado a partir de los datos experimentales. Las diversas mediciones de este parámetro en varios conjuntos de sismos alrededor del mundo indican valores entre $q \sim 1.6$ y $q \sim 1.7$. Por ejemplo en el catálogo de toda la Península Ibérica $q = 1.64$ [2], en el de la región de Andalucía $q = 1.60$ [2] y en el estado de California $q = 1.65$ [2].

En el presente estudio se pretende aplicar el modelo S-P a la totalidad del catálogo en toda la extensión de un país. Para este caso también existen ejemplos, como el catálogo histórico de sismos con magnitud $m \geq 6$ de China donde se obtiene $q = 1.69$ [3]. Otro estudio son los catálogos sísmicos del Istmo de Panamá donde para el catálogo principal en todo el país se obtiene $q = 1.69$ [4], para el catálogo de la región fronteriza con Costa Rica $q = 1.65$ [4] y para la zona del Canal de Panamá $q = 1.70$ [4].

La particularidad de la aplicación del modelo S-P al catálogo sísmico del Ecuador, se justifica al tratarse de un borde convergente muy activo ocasionado por la subducción de la placa de Nazca debajo de la placa Sudamericana [5], lo cual produce no sólo sismos de subducción sino además un gran número de terremotos crustales de magnitud considerable ($m > 5$) [5]. Otra característica singular de la sismicidad ecuatoriana es que la subducción sigue una geometría oblicua, haciendo que una parte de la corteza conocida como la astilla Norandina, se desprenda de la la corteza continental Sudamericana moviéndose hacia el norte [6]. Este rompimiento entre la astilla Norandina y la placa Sudamericana ocasiona un sistema de fallas muy activo conocido como Chingual-Cosanga-Pallatanga-Puná (CCPP) [6] responsable de algunos de los terremotos históricos más devastadores de la región andina del Ecuador [7].

Una de los retos de la aplicación de los modelos de sismicidad basados en el enfoque no extensivo es el relacionar el parámetro q con alguna característica del modelo físico de la producción de los sismos. El catálogo ecuatoriano permite de una manera clara separar dos tipos de fenómenos sísmicos diferentes, relacionados con la profundidad de los mismos. Efectivamente, existe una frontera clara entre los sismos superficiales, que se generan por fenómenos de fractura y rozamiento de materiales

frágiles, y los sismos de profundidad intermedia. Estos sismos de profundidad intermedia se consideran localizados a profundidades entre $\sim 70 \text{ km}$ y $\sim 300 \text{ km}$ [8–10]. Su mecanismo de generación no está todavía completamente explicado, siendo la fragilización por deshidratación es uno de los fenómenos físicos posibles para generarlos [8–10].

De estudios precisos de relocalización de la sismicidad en Ecuador mediante métodos de tomografía sísmica [11], se puede establecer que la frontera entre los sismos superficiales y los sismos de profundidad intermedia se produce a los 75 km , pues es a esta profundidad donde aparecen los nidos de sismicidad intermedia en la región del Ecuador [11].

El objetivo de este artículo es mostrar la aplicación de la entropía de Tsallis y de la teoría de la interacción fragmento-aspereza a la totalidad del catálogo sísmico del Ecuador calculando su parámetro de no extensividad q . Luego se procederá al mismo cálculo separando los sismos superficiales, con profundidad menor a los 75 km , de la sismicidad intermedia con profundidades que alcanzan desde los 75 km hasta los 350 km .

Otro problema importante en el uso de los modelos no extensivos de la sismicidad es la resolución del problema inverso que resulta al tratar de ajustar los datos con el modelo. Algunas de las opciones para este cálculo han sido los mínimos cuadrados no lineales de Levenberg–Marquadt [12] o el método de máxima verosimilitud [13]. En este artículo se muestra el uso del método de inversión que generaliza los mínimos cuadrados para problemas no lineales propuesto por A. Tarantola y B. Valette [14].

II. EL MODELO DE UN SISMO COMO LA INTERACCIÓN FRAGMENTO-ASPEREZA

Si bien existen numerosas aplicaciones de la entropía de Tsallis al estudio de los terremotos, es preciso reconocer que el modelo que posee la mayor base física y que aporta a la comprensión del fenómeno es el modelo de la fragmentación de asperezas de Sotolongo y Posadas (S-P). Este modelo consigue demostrar que la ley de Gutenberg-Richter es sólo la aproximación de una ley más general, deducida a partir de considerar el origen de los sismos como la ruptura de las anfractuosidades que juntan una falla sísmica [2].

Si comenzamos con la definición de la entropía de Tsallis para el caso de una distribución de probabilidad discreta que depende del parámetro q :

$$S_q = k \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i^q}{q - 1}, \quad (1)$$

W es el número total de configuraciones cuyas probabilidades son el conjunto $\{p_i\}$.

La mejor manera de ver la relación de esta fórmula (1) con la expresión clásica de la entropía de Boltzman-Gibbs es reescribirla como:

$$S_q = k \sum_{i=1}^W p_i \ln_q \frac{1}{p_i}, \quad (2)$$

donde se ha definido una nueva función:

$$\ln_q x = \frac{x^{1-q} - 1}{1 - q}. \quad (3)$$

Siendo $q \in \mathbb{R}$ el parámetro que permite cuantificar la complejidad del sistema. Si tomamos el límite de (3) cuando $q \rightarrow 1$ obtenemos la función logaritmo natural y por lo tanto (2) se transforma en la entropía de Boltzman-Gibbs $S = -k \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i$. Por lo tanto el sistema podrá considerarse como complejo cuando $q \neq 1$.

Para el modelo S-P debemos utilizar la forma continua de la entropía de Tsallis:

$$S_q = k \frac{1 - \int p^q(\sigma) d\sigma}{q - 1}. \quad (4)$$

Siendo $p(\sigma)$ la probabilidad de encontrar un fragmento de superficie σ dentro de la falla sísmica. Lo importante del modelo S-P es que logra relacionar la superficie del fragmento a la energía del sismo que se produciría si éste se rompiera.

Puesto que la energía es una medida de la magnitud finalmente se obtiene que el número de sismos con una magnitud mayor que un valor m , $N(> m)$, que se producen durante la fragmentación de la aspereza es [2]:

$$\log(N(> m)) = \log N + \left(\frac{2-q}{1-q} \right) \times \times \log \left[1 + a(q-1)(2-q)^{(1-q)/(q-2)} 10^{2m} \right]. \quad (5)$$

Con N el número total de sismos considerados en el estudio y a un parámetro de proporcionalidad.

El resultado se expresa como un logaritmo en base 10 ya que nos permite relacionarlo con la fórmula de Gutenberg-Richter:

$$\log(N(> m)) = c_1 - c_2 m. \quad (6)$$

Vemos pues que el modelo S-P generaliza la ley de Gutenberg-Richter, ya que la ecuación (6) es solamente un caso particular de la ecuación (5).

III. DATOS Y CÁLCULO DE PARÁMETROS

Los datos para este estudio provienen del Catálogo Sísmico del Instituto Geofísico de la Escuela Politécnica Nacional del Ecuador. Este catálogo comprende los terremotos registrados en el territorio ecuatoriano desde el año 1901 hasta el 27 de agosto de 2016. Estos son 12 016 sismos con valores de magnitud entre 3 y 8.35. La distribución de los sismos en función de su magnitud se muestra en la Figura (1).

Para calcular sobre estos datos los parámetros de complejidad q y de proporcionalidad a que aparecen en la ecuación (5) usaremos la solución del problema inverso desde la perspectiva bayesiana [14]. En este caso escribimos estos parámetros en un vector $\mathbf{v}$ y utilizamos como vector de datos

$\mathbf{d}$ el logaritmo del número de eventos mayor que m . Por lo tanto el problema directo queda:

$$\mathbf{d} = g(\mathbf{v}), \quad (7)$$

Donde g es la relación funcional dada por el modelo S-P (5).

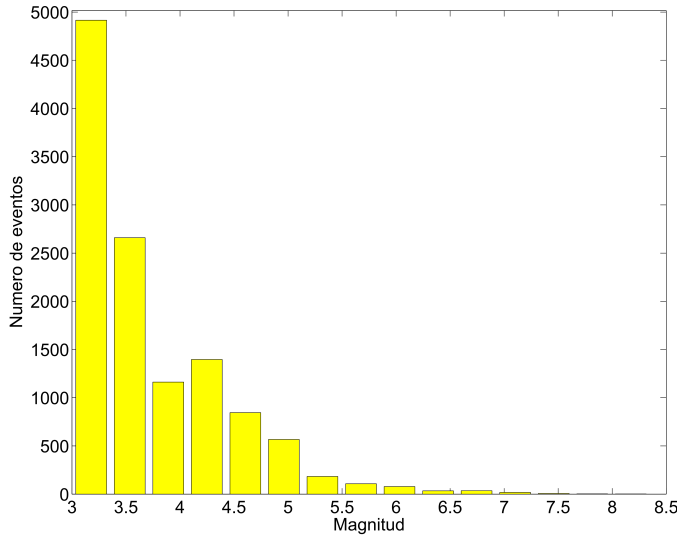


Figura 1. Histograma del número de eventos sísmicos en función de su magnitud en el catálogo del Instituto Geofísico del Ecuador.

Para obtener $\mathbf{v}$ a partir de (7) debemos resolver un problema inverso no lineal que se obtiene en la convergencia del algoritmo [14]:

$$\mathbf{v}_{k+1} = \mathbf{v}_0 + C_v G_k^* (C_d + G_k C_v G_k^*)^{-1} \times [\mathbf{d} - g(\mathbf{v}_k) + G_k (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_0)]. \quad (8)$$

Donde G es la matriz de derivadas parciales y G^* su transpuesta:

$$G = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial q} \log(N(> m)) & \frac{\partial}{\partial a} \log(N(> m)) \end{bmatrix}. \quad (9)$$

Las derivadas para el cálculo de G en nuestro caso son:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial q} \log(N(> m)) &= \frac{1}{(1-q)^2} \log[1 + a(q-1)(2-q)^{(1-q)/(q-2)} 10^{2m}] + \\ &+ \left(\frac{2-q}{1-q} \right) \frac{\log(e) a 10^{2m}}{[1 + a(q-1)(2-q)^{(1-q)/(q-2)} 10^{2m}]} \times \\ &\times [(2-q)^{(1-q)/(q-2)} + \\ &+ (q-1)(1-q + \ln(2-q))(2-q)^{(5-3q)/(q-2)}], \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial a} \log(N(> m)) = \frac{-\log(e) 10^{2m} (2-q)^{1/(2-q)}}{[1 + a(q-1)(2-q)^{(1-q)/(q-2)} 10^{2m}]}.$$

Para el valor inicial de los parámetros tomamos la referencia los estudios anteriores en otros catálogos sísmicos [2] $q_0 = 1.6$ y $a_0 = 3 \times 10^{-6}$.

Las matrices C_v y C_d son matrices de covarianza cuadradas que tienen en su diagonal la varianza sobre los parámetros a priori y sobre los datos respectivamente. Para la varianza inicial de los parámetros empezamos con un valor

suficientemente grande $\sigma_{q_0}^2 = \sigma_{a_0}^2 = 100$ que garantice una oscilación considerable en las primeras iteraciones del algoritmo. Para la varianza de los datos, puesto que el catálogo ecuatoriano no informa el error en el cálculo de la magnitud, asumimos un error para la magnitud de $\sigma_d = 0.1$.

Con estos valores a priori y con los mencionados valores de covarianza, el algoritmo (8) converge en una pocas iteraciones. En diez iteraciones el algoritmo se estabiliza en los valores $q = 1.71$ y $a = 4.31 \times 10^{-6}$. El ajuste de los datos con la función definida con los parámetros calculados se puede apreciar en la figura (2).

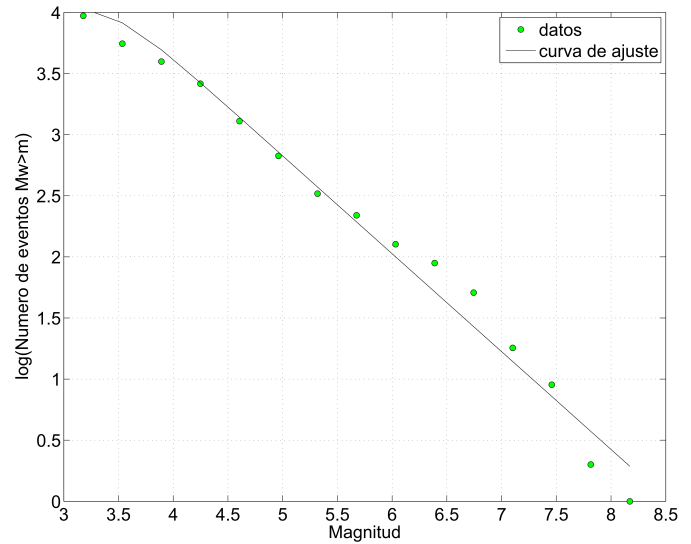


Figura 2. Se muestran con pequeños círculos el logaritmo del número de eventos con magnitud mayor a m en función de m . Se indica también con una línea continua la curva de ajuste con los parámetros obtenidos mediante la inversión bayesiana.

En cuanto al error que cometemos en este ajuste, se puede calcular mediante la aproximación bayesiana la matriz de covarianzas a posteriori para los parámetros [14]:

$$C_v = (G^* C_d^{-1} G + C_{v_{\text{priori}}}^{-1})^{-1}. \quad (10)$$

Esto nos permite encontrar $\sigma_q = 5 \times 10^{-3}$ y $\sigma_a = 1.95 \times 10^{-6}$. Claramente estos son valores que han convergido correctamente desde los valores que tomamos como a priori $\sigma_q = \sigma_a = 10$.

Los sismos del catálogo ecuatoriano se separan ahora en dos conjuntos de acuerdo a su profundidad: 10 033 son sismos superficiales que tienen profundidad menor a 75 km y 1 978 son sismos de profundidad intermedia que se localizan a profundidades mayores o iguales a la cota de 75 km. El conjunto de sismos de profundidad intermedia no incluye cinco sismos del catálogo principal que se localizan a profundidades mayores a 350 km.

Bajo el esquema de inversión del algoritmo (8) el valor del parámetro de no extensividad para los sismos superficiales del Ecuador es $q = 1.72$ con $\sigma_q = 5 \times 10^{-3}$. Para los sismos de profundidad intermedia en cambio $q = 1.74$ con $\sigma_q = 7 \times 10^{-3}$.

IV. DISCUSIÓN Y CONCLUSIONES

Para obtener el parámetro de no extensividad del modelo S-P se ha mostrado la implementación que resuelve el problema inverso desde un enfoque bayesiano. En los sismos del catálogo sísmico ecuatoriano, el parámetro de no extensividad toma un valor de $q = 1.71 \pm 0.005$. Para los sismos superficiales del Ecuador $q = 1.72 \pm 0.005$ y para los sismos de profundidad intermedia $q = 1.74 \pm 0.007$.

La primera constación clara es que estos valores de q son mayores que los calculados en otras regiones del planeta usando la teoría S-P [2–4]. El parámetro q puede interpretarse como una medida cuantitativa de la longitud de escala en las interacciones espaciales [12]. Esto querría decir que mientras mayor sea el valor de q , el sistema formado por toda la sismicidad, tiene un mayor número de componentes que no pueden ser analizados de forma separada pues todos se hallan interrelacionados. En el caso de los sismos del Ecuador, el alto valor de q respecto a otros catálogos sísmicos se explicaría en que la totalidad de los sismos ecuatorianos se producen en diversos fenómenos todos muy relacionados entre sí como son: la subducción de la placa de Nazca, el escape hacia el norte de la astilla Norandina y las abundantes fallas de la corteza.

El valor de $q = 1.72$ para los sismos superficiales es ligeramente menor que el $q = 1.74$ para los sismos de profundidad intermedia. Puesto que el mecanismo de generación de los sismos de profundidad intermedia no está completamente esclarecido, la sola conclusión por el momento es que el parámetro q puede indicar efectivamente una diferencia en la fuente de origen de los dos tipos de sismos.

En lo que respecta al parámetro de proporcionalidad a de la teoría S-P, el valor que se obtiene para los sismos del Ecuador es $a = 4.31 \times 10^{-6} \pm 1.95 \times 10^{-6}$. La indeterminación importante en el valor de este parámetro es sobre todo función del valor del error de los datos que hemos considerado.

El aporte más importante a la sismología desde los resultados de este estudio, es mostrar que los sismos con magnitud menor a 3.5 no siguen la relación lineal de la ley Gutenberg-Richter. Como se muestra en la figura (2), para las magnitudes menores que 3.5 hay un cambio de pendiente en la curva de ajuste calculada con la teoría S-P. Los estudios anteriores para la ley Gutenberg-Richter con los datos del catálogo ecuatoriano se restringen solamente a las magnitudes $4 \leq m \leq 7.5$ [15]. Este estudio amplía el análisis a todo el rango de magnitudes presentes en el catálogo. Esta conclusión respecto a los sismos de pequeña magnitud está

respaldada en el hecho de que en el catálogo ecuatoriano, los sismos con magnitud menor a 4 se incorporan solamente a partir del año 1997. La magnitud de estos sismos poco energéticos ha sido además cuidadosamente revisada y homogenizada para su incorporación al catálogo general [15].

AGRADECIMIENTOS

Los comentarios y correcciones de un árbitro anónimo han sido invaluable en la elaboración de este artículo.

REFERENCIAS

- [1] C. Tsallis, *Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics - Approaching a Complex World*, (Springer, 2009).
- [2] O. Sotolongo-Costa and A. Posadas, *Phys. Rev. Lett.* 92, 04850-1 (2004).
- [3] O. Sotolongo-Costa, *Acta Geophys.* 60, 526 (2012). <https://doi.org/10.2478/s11600-012-0010-3>
- [4] D. Samudio, P. Weigandt, J. Toral, and O. Sotolongo-Costa, *Nova Scientia* 7, 149 (2015).
- [5] H. Yepes, L. Audin, A. Alvarado, C. Beauval, J. Aguilar, Y. Font and F. Cotton, *Tectonics* 35, 1249 (2016)
- [6] A. Alvarado, L. Audin, J. M. Nocquet, E. Jaillard, P. Mothes, P. Jarrín, M. Segovia, F. Rolandone, and D. Cisneros, *Tectonics* 35, 1048 (2016).
- [7] C. Beauval, H. Yepes, W.H. Bakun, J. Egred, A. Alvarado and J.C. Singaicho. *Geophys. J. Int.* 181, 1613 (2010).
- [8] H. Houston, *Deep earthquakes, Treatise on Geophysics*, 2nd Ed. (Elsevier, Amsterdam, 2007), pp. 321–350.
- [9] C. Frohlich and Y. Nakamura, *Phys. Earth Planet. Inter.* 173, 365 (2009).
- [10] G.A. Prieto, G.C. Beroza, S.A. Barrett, G.A. López, and M. Florez. *Tectonophysics*, 570, 42-56 (2012)
- [11] S. Araujo, "Travel time tomography of the crust and the mantle beneath Ecuador from data of the national seismic network". Tesis de doctorado, University of Grenoble Alpes, 2016.
- [12] L. Telesaca, *Tectonophysics* 494, 155 (2010).
- [13] L. Telesaca, *Bull. Seismol. Soc. Am.* 102, 886 (2012).
- [14] A. Tarantola and B. Valette, *Rev. Geophys.* 20, 219 (1982).
- [15] C. Beauval, Yepes, H., Palacios, P., Segovia, M., Alvarado, A., Font, Y., Aguilar, J., Troncoso, L., and S. Vaca, *Bull. Seismol. Soc. Am.* 103, 773 (2013).

EXPERIMENTAL STUDY ON THE EFFECT OF Nd:YAG LASER ON DENTAL HARD TISSUE: COMPARISON BETWEEN MULTI-PULSE AND FREE-GENERATION MODES

ESTUDIO EXPERIMENTAL DEL EFECTO DE UN LÁSER Nd:YAG SOBRE EL TEJIDO DENTAL DURO: COMPARACIÓN ENTRE LOS MODOS DE GENERACIÓN MULTI-PULSO Y LIBRE

A. CARBALLOSA-AMOR^{a†}, E. PONCE-FLORES^b, H. TELLEZ-JIMENEZ^a, T. FLORES-REYES^c

a) School of Dentistry, Autonomous University of Tamaulipas, Mexico; anacar92@yahoo.com[†]

b) Technological University of Altamira, Tam, Mexico

c) Instituto Politécnico Nacional, CICATA Altamira Tamaulipas, México

† corresponding author

Recibido 4/10/2017; Aceptado 11/10/2017

The goal of the present study is to compare the morphological changes in dental hard tissue that are obtained through the use of passively Q-Switched multi-pulse Nd:YAG laser irradiation, with a free-generation mode Nd:YAG laser. The experimental samples consisted of six healthy third molars that were divided equally and randomly for the two irradiation methods. The depth of each perforation was quantified using optical coherence tomography (OCT). The highest fluency and the shortest duration of the pulses obtained by the multi-pulse laser with a Q-switch allowed for more efficient ablation of the dental material than what was obtained via the free-generation mode.

El objetivo del presente estudio es comparar los cambios morfológicos en el tejido dental que se obtienen mediante irradiación con láser de Nd: YAG en modo multi-pulso con Q-Switched pasivo y láser Nd: YAG en modo de generación libre. Las muestras experimentales consistieron en seis terceros molares sanos que se dividieron igualmente y aleatoriamente para los dos métodos de irradiación. La profundidad de cada perforación se cuantificó utilizando la tomografía de coherencia óptica (OCT). La fluidez más alta y la duración más corta de los pulsos obtenidos por el láser de Nd: YAG en modo multi-pulso con Q-Switched pasivo permitió una ablación más eficiente del material dental que la obtenida mediante el modo de generación libre.

PACS: Laser ablation, 79.20; Eb, Q-switching 42.60. Gd; Laser imaging, medical, 42.62. Be

I. INTRODUCCIÓN

Since its inception in 1960, laser irradiation has facilitated myriad medical and dental treatments. Pioneers in the field of dentistry (Fisher and Frame in the United Kingdom, Pecaro and Pick in the United States, and Welcer in France), proposed the use of CO₂ lasers in soft tissue surgeries. Melcer also began to conduct these applications in hard tissues. Recent developments in laser dentistry have led to its approval for various dental treatments, being accepted by dentists and patients [1].

There are two classes of lasers that are employed in the medical field, namely: high-power lasers (surgical applications), and low-power lasers (therapeutic applications). Nd:YAG lasers fall within the first group, emitting its power within the infrared range. In the dentistry field, it is primarily used in periodontics and endodontics, due to its efficacy in the elimination of microorganisms [2,3].

An average absorption at 1064 nm wavelength, corresponding to the Nd:YAG laser has been reported. In order to enhance laser penetration, studies have employed dyes to treat samples prior to irradiation [4,5]. The precise control of laser-initiated temperature in dental tissues is of the utmost importance, as it may cause irreversible pulp damage beyond certain limits [6]. Three methods have been proposed to prevent excessive temperature increases, namely: (a) pulse

duration should be less than the time constant of thermal relaxation of the dental material; (b) the pause between pulses should be greater than the time of thermal relaxation to allow the proper cooling of the material; and (c) refrigerated water irrigation of irradiated areas should be used to reduce the temperature [7,8]. Previous studies that have assessed the use of Nd:YAG lasers in dentistry have reported its use in continuous and pulsed regimes, the latter of which has two variants: free-generation and Q-switch.

The first variant generates pulses with durations within the range of from between 0.1 and several milliseconds, which tends to initiate perceptible thermal effects. The second variant has much shorter pulse duration, within the nanosecond range. However, its thermal action is quite limited, as is the speed of material extraction. Consequently, the cost of the equipment is higher [4,9].

A particular Q-switch regime that has been used more recently is referred to as multi-pulse. The pulse or laser shot, which lasts from tens to hundreds of microseconds, actually consists of a group of pulses, each of which has 10 to 30 ns duration. This type of laser uses a passive Q-switch, based on a Cr: YAG crystal, which is much more simple and robust than the electro-optically based switches that are used in mono-pulsed lasers. It also allows for cheaper and more compact laser irradiation [10]. Multi-pulsed lasers based on passive switches have been used in applications

such as pulsed laser deposition [11], the selective treatment of biomaterials or food [12], and recently, as a component of laser-induced plasma spectroscopy [13,14].

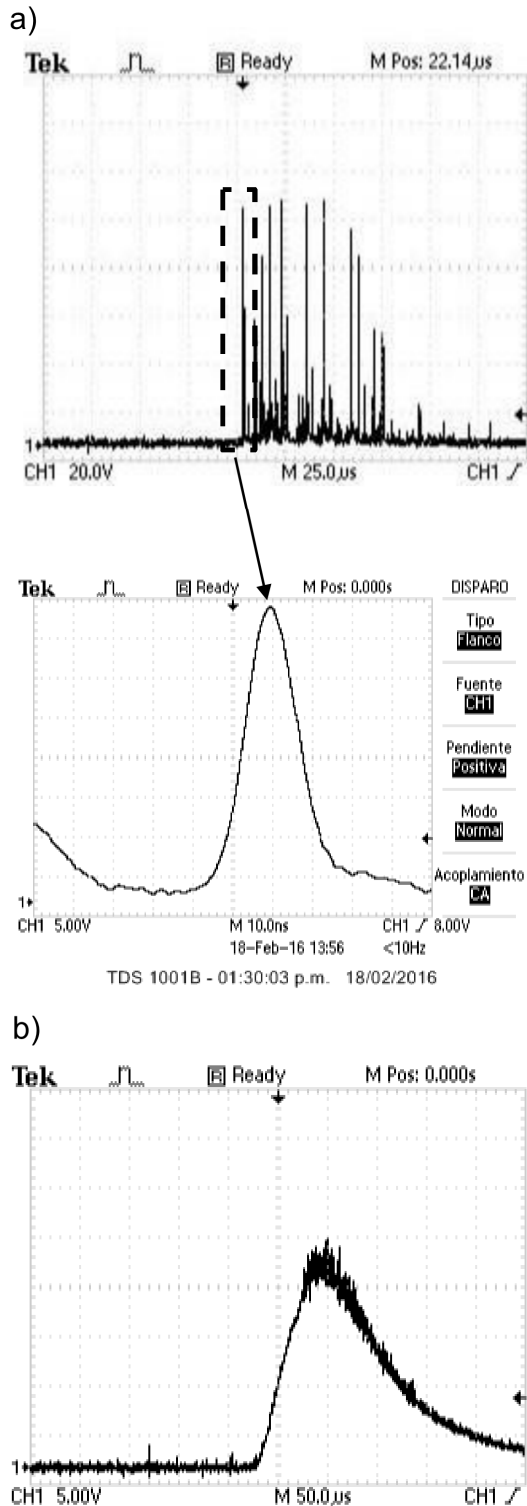


Figure 1. (a) Temporal profile of the laser shot in multi-pulse regime. The insert above, reveals the details of a single micro-pulse, and (b) one of the pulses in the free-running regime.

To date there have been no investigations into the effects of multi-pulse Nd:YAG laser irradiation on dental materials. The goal of the present study was to determine and

compare perforation speeds and morphological changes in dental structures following Nd:YAG laser irradiation using free-generation and multi-pulse modes. The latter mode might offer significant advantages, such as decreasing the thermal effects of lasers that operate in the free generation mode, thus maintaining a suitable perforation speed for laser systems that are employed in dentistry.

We conducted a comparative study between multi-pulse and free-generation regimes that were used to perforate healthy molars. The results were confirmed by means of optical coherence tomography (OCT).

II. METHODS

II.1. Study Sample

The samples consisted of six healthy third molars, which were donated by the School of Dentistry of the Autonomous University of Tamaulipas. The molars underwent two longitudinal cuts on opposite sides to obtain dentin tissue exposure and an area free of irregularities, as well as to maintain a constant distance between the samples and the lens with the lowest possible variation. The samples were immersed in water and placed in an ultrasonic cleaner (Branson 1510), at a temperature of 27°C for 15 minutes. Subsequently, they were placed in a specimen holder at a regular distance of 1 cm.

II.2. Instruments used in the experiment

We employed a multi-pulse Nd: YAG laser with Cr:YAG as a passive Q-switch. This laser emitted a wavelength of 1064 nm and was supplied by Bralax Company. In this irradiation regime, each laser shot consisted of a train of pulses with a total duration of approximately 75 μs (FWHM), and a configurable energy that ranged from 60 to 380 μJ. Each shot consisted of a total of pulses that varied from 15 to 25 with a duration of 30 ns each (see figure at top left). The oscillograms of Figures 1a and 1b illustrate the form and duration of a single shot, and one of the pulses that forms it, respectively.

The removal of the Cr:YAG crystal from the cavity allowed the laser to irradiate in the free-generation regime. Each shot was approximately 250 ns in duration, with energies that ranged from 280 to 830 μJ. The oscillogram of Figure 2 illustrates the form and duration of a single shot in this generation mode. For the two generation modes, we employed a 5-cm focal-length lens, which produced a spot of approximately 0.5 mm in diameter on the surface of the sample.

The form and depth of each perforation was determined by means of OCT. Spectral domain optical coherence tomography (SD-OCT) is a measurement method that is based on the detection of differences in the optical path length. This technique incorporates a light source with a wide spectrum, and a spectrometer, to recreate depth profiles that are achieved by cross-sectional imaging, which can

be used to display three-dimensional reconstructions. This measurement method reconstructs images of the voids that are generated by laser ablation, in order to observe changes in the samples. The equipment used was the CALLISTO system, Thorlabs, whose central wavelength was 930 nm and maximum depth resolution was 1.6 μm . We used a PDA10A photodetector (Thorlabs Inc.) and a TDS1001b oscilloscope (Tektronix®) to obtain the temporal profiles of the shots in the two regimes.

II.3. Description of the experiment

The samples were divided equally and randomly for the two irradiation methods. We performed five perforations in the dental tissue at a regular distance of 1 mm, with a difference of five shots with respect to the next sample, up to a total of 25 shots. The shots were made into the dentin of the coronal portion of the teeth, between the enamel coat and the pulp cavity, and horizontal to the longitudinal axis of the teeth (Figure 2). The approximate energy density of the multi-pulse and the free-generation laser shots were 36 J/cm^2 and 10^5 J/cm^2 , respectively.

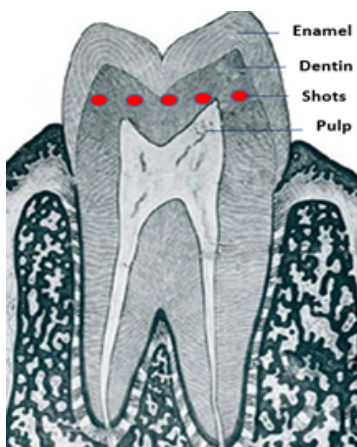


Figure 2. Experimental scheme of the sample. Longitudinal cut of a tooth extracted with the shots performed

We performed the characterization of the perforations through images obtained by optical microscopy at 50X magnification. Additionally, we obtained images of the cavities profiles using the OCT technique. Figure 3 illustrates the profiles of the perforations carried out with the two methods.

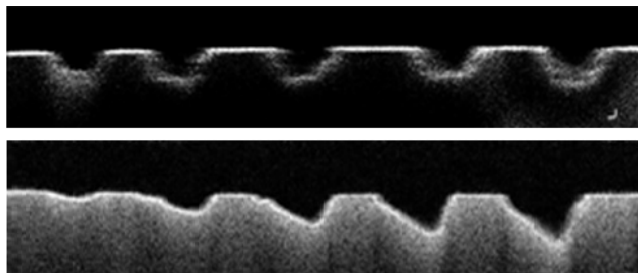


Figure 3. OCT imaging of the perforation profiles: (Top) multi-pulse mode, (Bottom) free-generation mode.

III. RESULTS AND DISCUSSION

Figure 4 shows that the depth of the cavities were typically greater after the first M. At one point, between 15 and 20 shots, the depth obtained by the free-generation mode was greater than that obtained by the multi-pulse mode and, in general, the perforation speed obtained was greater. This result was due to the fact that the energy was greater in the free-generation mode. It is important to emphasize that although these shots were made using different energy levels, the power consumption of the laser remained constant, since, as it is known, the use of a Q-switch generates losses of energy in the irradiation compared with the free-generation mode. It is worth mentioning that when we used the same energy level of the multi-pulse mode in the free-generation mode, we did not obtain any ablation. This result indicated that the absorption by the material was more efficient using the multiple Q-switch laser pulses. This results from achieving higher fluencies that exceed the rupture threshold of the material more easily, with energy similar to that used in the free-generation mode.

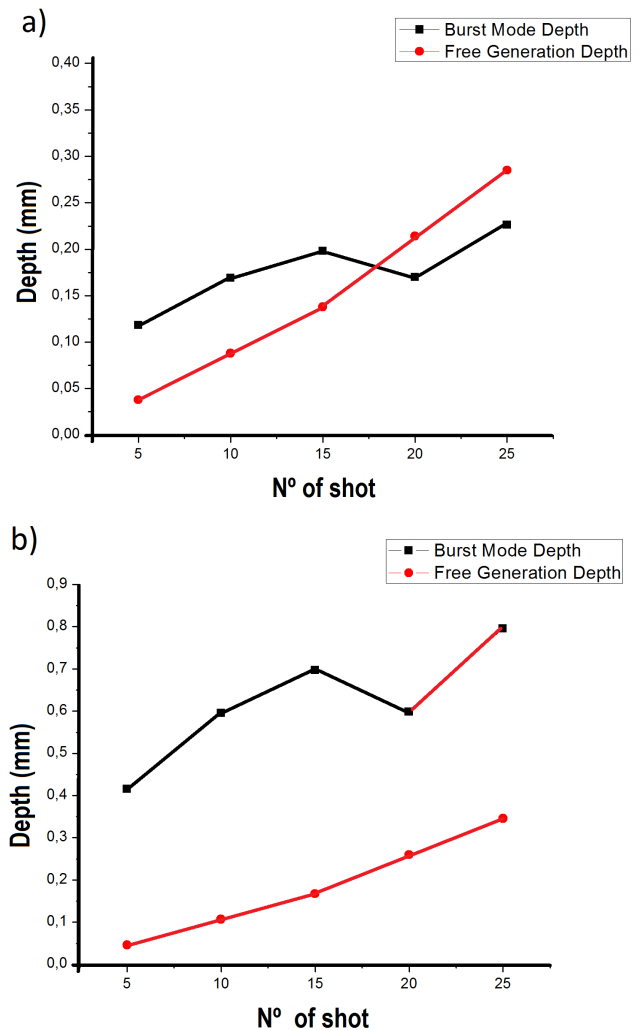


Figure 4. Results obtained in void depth versus number of pulses, with the two methods contrasted (a) and normalised with their respective energies (b).

In order to compare the effects of the two methods, despite using different energies, we obtained the relationship of each depth with their associated energy. Figure 4b reveals the experimental results and trend lines. An extraction speed of similar material can be observed in the two generation modes. However; the experiment indicated that greater depths were obtained in the multi-pulse mode at the same energy levels.

In addition to the depth that may be obtained with one laser mode or the other, the quality of the perforation, damage to the surrounding tissue, and the temperature to which the dental material is submitted are of the utmost importance. In order to qualitatively assess this aspect, we obtained images via optical microscopy at 50X magnification (Figure 5).

There was clear evidence of greater thermal effect on the perforations made in the free-generation mode due to greater duration of the pulses. High temperatures achieved greater tissue calcination in this mode, a result that had already been reported in previous studies [15].

Further, it should be noted that the Nd:YAG laser in free-generation mode melted the material surrounding the perforations, and created edges of melted material deposited around them.

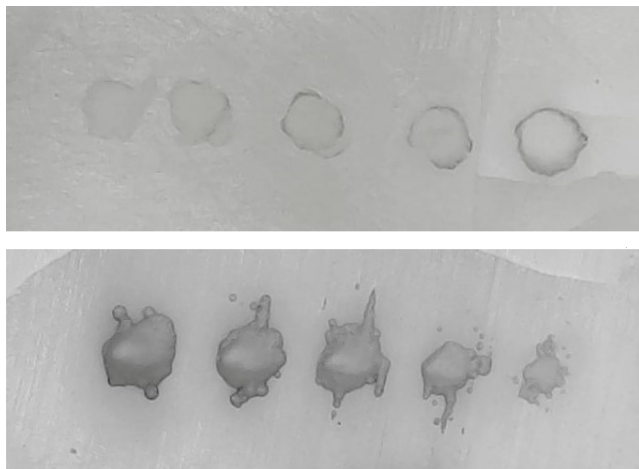


Figure 5. Images obtained by optical microscopy at 50X magnification: a) multi-pulse mode; b) free-generation mode.

IV. CONCLUSIONS

The highest fluency and the shortest duration of the pulses obtained by a multi-pulse laser with a Q-switch enabled more efficient ablation of the material than that obtained in the free-generation mode.

On the other hand, the quality of the voids characterized by the non-existence of remains or edges caused by the

ablation process were obviously improved as a result of the multi-pulse mode, which was an expected result due to shorter duration of the pulses and, therefore, heat transfer with a consequent thermal effect. If we take into account that multi-pulse irradiation was obtained using a Q-switch, which is characterized by its simplicity, low cost and robustness, the potential of using this laser emission regime in dentistry becomes evident.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors are thankful to the Laser Technology Laboratory of CICATA - Altamira Unit for their support.

REFERENCES

- [1] R. M. Pick, J. Am. Dent. Assoc. 124, 37 (1993).
- [2] A. J. España-Tost, J. Arnabat-Domínguez, L. Berini-Aytés, and C. Gay-Escoda, RCOE 9, 497 (2004).
- [3] D. Zavaleta-de la Huerta, A. J. España-Tost, L. Berini-Aytés, and C. Gay-Escoda, RCOE 9, 539 (2004).
- [4] A. McDonald, N. Claffey, G. Pearson, W. Blau, and D. Setchell, Biomaterials 23, 51 (2002).
- [5] A. Mehl, L. Kremers, K. Salzmann, and R. Hickel, Dent. Mater. 13, 246 (1997).
- [6] L. Zach and G. Cohen, Oral Surgery, Oral Medicine, Oral Pathology 19, 515 (1965).
- [7] T. J. Flotte, R. Anderson, and T. F. Deutsch, Lasers Surg. Med. 8, 108 (1988).
- [8] C. T. Vangsness, T. Watson, V. Saadatmanesh, and K. Moran, Lasers Surg. Med. 16, 61 (1995).
- [9] A. V. McDonald, N. M. Claffey, G. J. Pearson, W. Blau, and D. J. Setchell, Lasers Surg. Med. 27, 213 (2000).
- [10] T. Flores, L. Ponce, M. Arronte, and E. DePosada, Opt. Lasers Eng. 47, 578 (2009).
- [11] T. Garcia, J. Sanchez, S. Diaz, L. Ponce, E. Estevez, J. Pena, P. Bartolo, and M. Farias, Mater. Lett. 28, 65 (1996).
- [12] L. Ponce, T. Flores, M. Arronte, V. Parfenov, L. Koval'chuk, and L. Bartoli, J. Opt. Technol. 75, 490 (2008).
- [13] F. Alvira, T. F. Reyes, L. P. Cabrera, L. M. Osorio, Z. P. Baez, and G. V. Bautista, Appl. Opt. 54, 4453 (2015).
- [14] L. M. Osorio, L. V. P. Cabrera, M. A. A. García, T. F. Reyes, and I. Ravelo, J. Phys.: Conf. Ser. 274, 012093 (2011).
- [15] H. Wigdor, E. Abt, S. Ashrafi, and J. T. Walsh, J. Am. Dent. Assoc. 124, 65 (1993).

AUTOMATIZACIÓN DE EXPERIMENTOS CON ARDUINO

AUTOMATION OF EXPERIMENTS USING ARDUINO

J. A. LESTEIRO-TEJEDA^a, D. HERNÁNDEZ-DELFIN^a, A. J. BATISTA-LEYVA^{a†}

a) Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC), Universidad de La Habana, Cuba; abatista@instec.cu

† autor para la correspondencia

Recibido 15/10/2017; Aceptado 30/10/2017

La experimentación es base fundamental del método científico. La realización de experimentos precisos y exactos sirve para ganar conocimiento del Universo, esencial tanto para la formulación de nuevas teorías como para comprobarlas, una vez formuladas. Una tendencia contemporánea es la automatización de las instalaciones experimentales, lo que garantiza la repetitividad de las condiciones de realización del experimento, así como una flexibilidad extrema en el diseño de las mediciones. Un aspecto que no debe soslayarse es el costo de las instalaciones. En la presente contribución discutimos elementos del plan de estudios de las carreras de ciencias e ingeniería del InSTEC relacionados con la experimentación. Luego discutimos brevemente la arquitectura y programación de un micro-controlador Arduino, centrándonos en la automatización de algunas prácticas de laboratorio de Física General para estudiantes usando dichos dispositivos. Por último, discutimos los beneficios potenciales para el desempeño profesional del graduado, así como para sus competencias profesionales.

Experimentation is an essential component of the Scientific Method. Performing precise and exact experiments creates knowledge about the Universe, key for the formulation of new theories and for testing them, once they are formulated. Trending in modern experimental physics is the design of automatized measurement installations, which guarantees the constancy of experimental conditions, as well as an extreme flexibility in the measurement's design. Keeping low the cost of the equipment is something very important. University curricula on experimental physics must be adapted to these requirements if we want to graduate professionals well fitted to modern science and industry. In the present contribution we first discuss the experimental objectives in the curricula of the students at InSTEC, University of Havana. Then we analyze the use of Arduino based devices in the automation of some laboratory experiments and finally discuss the potential benefits for the professional performance and professional competences after graduation.

PACS: Computers in experimental physics, 07.05.-t; Design of experiments (computers), 07.05.Fb; Laboratory experiments and apparatus, 01.50.Pa; Physics education laboratory experiments, 01.50.Pa; Control devices, 07.07.Tw

I. INTRODUCCIÓN

La experimentación constituye un componente esencial de la Física. Es a través de la interacción con el entorno que se adquieren los conocimientos del comportamiento de las magnitudes físicas y sus interrelaciones que, luego de un proceso de abstracción, se convertirán en leyes y teorías físicas. Y es a través de experimentos que las predicciones de dichas teorías se contrastan con la realidad para precisar sus límites de validez y campos de aplicación.

Esta es la razón por la cual en el currículo de Física General para estudiantes de ciencias naturales e ingeniería los laboratorios tienen tanta importancia. En ellos los estudiantes adquieren habilidades en el diseño, realización y procesamiento de datos de experimentos que de alguna forma inciden sobre la teoría que han estudiado en conferencias. Realizando experimentos toman consciencia del poder predictivo de las teorías físicas. Lo dicho anteriormente implica la necesidad de la actualización constante de dichas prácticas, atendiendo a los contenidos, métodos y procesamiento numérico de los resultados.

La ciencia experimental moderna precisa de los experimentos automatizados. Esto puede estar vinculado con la agresividad de los entornos de medición (como es usual en las ciencias nucleares), con la realización de mediciones prolongadas o en lugares de difícil acceso (típico de

las ciencias de la Tierra), con la medición de múltiples parámetros simultáneamente o con regímenes de medición complejos, por ejemplo [1]. Es así que resulta conveniente introducir la automatización de las prácticas de laboratorio con dispositivos que sean seguros, fácilmente programables y baratos.

Estas características las cumplen los micro-controladores (μ c) Arduino [2]. En la presente contribución discutimos su aplicación en la realización de algunas prácticas de laboratorio de Física General, analizando cómo puede esto influir en las competencias profesionales del graduado.

II. DESARROLLO

II.1. Importancia de la experimentación en el currículo académico

Cuando se analizan los planes de estudio de las carreras del InSTEC (y de otras carreras de ciencia e ingeniería) se percibe la importancia de la experimentación para los graduados. Así, en los modos de actuación del Físico Nuclear se explicita que “deben realizar investigaciones destinadas a mejorar la eficiencia de los procesos productivos y de servicios, montar nuevas técnicas de análisis, [...] realizar investigaciones de carácter aplicado, desarrollando [...] el procesamiento computacional de los resultados” [3].

Cuando se estudia el campo de acción del graduado, este siempre incluye la aplicación de la automatización y la computación a los diferentes objetos de trabajo. Vemos además que entre las funciones se encuentra “participar en tareas de perfeccionamiento de procesos tecnológicos y en la introducción de nuevas tecnologías, construcción de equipos y sistemas de medición automatizados, además desarrollar software y hardware.”

En el caso particular de los Físicos Nucleares se observa que un objetivo general instructivo es “Organizar el trabajo de un laboratorio experimental, diseñando, montando y utilizando instalaciones para las mediciones nucleares”. Estos aspectos se aplican igualmente a los Ingenieros en Tecnologías Nucleares y Energéticas y a los Licenciados en Radioquímica.

Esto nos dice que cualquier mejora en la enseñanza de las técnicas experimentales redundará en las habilidades profesionales del graduado, en su desempeño y sus competencias profesionales.

Una forma de hacer esto consiste en introducir la automatización de experimentos en algunas prácticas de Física General, para que los estudiantes se familiaricen con estas técnicas, y puedan utilizarlas en su vida profesional. Son muchas las formas de realizar la automatización de los experimentos. Lamentablemente una parte importante de ellas consiste en la aplicación de tarjetas de adquisición de datos sumamente costosas, lo que lo hace prohibitivo en nuestra educación superior. Una solución es el uso de placas Arduino.

II.2. Micro-controladores Arduino

Arduino (Figura 1) surgió como proyecto educativo en año 2005 y en la actualidad es la tecnología líder en el mundo DIY (Do It Yourself) [4], aunque no la única [5,6]. Esta plataforma de desarrollo está basada en el micro-controlador Atmel AVR [7] e incorpora CPU, puerto serial para intercambio de datos, memoria, pines que permiten ser configurados como entrada y salida digitales y de entrada analógicos. Los microprocesadores más usados, todos de 8 bits, son ATmega168, ATmega328, ATmega1280, ATmega8 pues estos son simples, de bajo costo y permiten el desarrollo de una gran variedad de diseños. Desde el 2012, Arduino agregó el uso del CortexM3 de ARM de 32 de bits para aplicaciones que lo requieran. A través de los puertos el μ c se conecta con un grupo de sensores y actuadores.

Arduino IDE es un entorno de desarrollo integrado en el que se escribe el código que se cargará en el μ c. Tiene incorporado opciones de ayuda y ejemplos que facilitan la programación. Entre otras herramientas cuenta con un monitor serial, por la cual podemos enviar instrucciones al μ c y recibir los datos mientras se ejecuta el programa. Este software se puede obtener gratuitamente y para varios sistemas operativos en la página oficial de Arduino [8].

Arduino C es el lenguaje de programación en el que se escriben los códigos. Es una variante de C, con funciones y

librerías especiales para el trabajo con los μ c. Existen diversas fuentes de consulta disponibles gratuitamente [8–10].

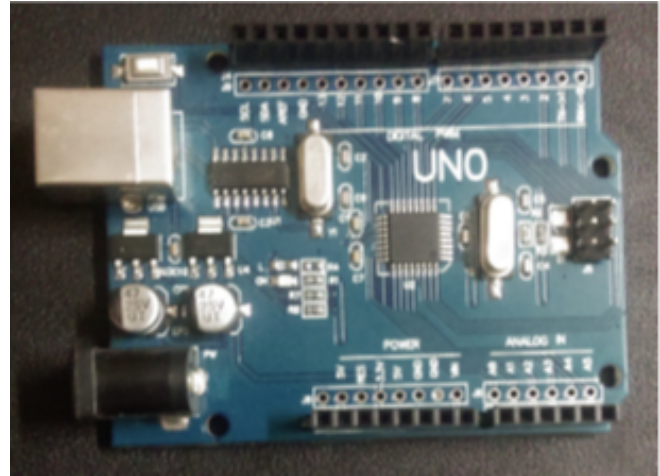


Figura 1. Foto de un modelo de Arduino (Arduino UNO) muy utilizado.

Para Arduino se pueden adquirir sensores y actuadores compatibles que permiten explotar su rendimiento al máximo asignándole disímiles tareas. Existen en el mercado diversos tipos de juegos de sensores, cubriendo una gama muy amplia (y creciente) de mediciones.

II.3. El uso de Arduino en laboratorios de Física General

A continuación describimos el uso de Arduino en un grupo de prácticas de distintas asignaturas de la Física General.

Las prácticas son:

1. Estudio de la caída libre (Mecánica)
2. Carga – descarga de un condensador (Electromagnetismo)
3. Estudio de la luz polarizada (Óptica)
4. Medición y control de magnitudes físicas (práctica conclusiva)

La idea general que siguen todas estas prácticas es la siguiente: se conecta al Arduino un sensor adecuado para medir la magnitud física de interés, al igual que cualquier salida de voltaje en caso que sea necesario y se carga un programa que controla el trabajo de todas las partes y almacena la información. Mostramos debajo un breve resumen de cómo se organiza cada práctica y describimos en más detalle la práctica 2.

II.4. Estudio de la caída libre

Se usa Arduino como contador de tiempo. El objeto se suspende de un electroimán, comenzando a caer al interrumpir Arduino la corriente de alimentación. El contador se detiene cuando un sensor de luz detecta la

interrupción del flujo luminoso que llega desde una fuente (que puede ser alimentada por Arduino). El programa entrega el tiempo que transcurre en el proceso (ver información suplementaria).

II.5. Carga descarga de un condensador

Esta práctica de laboratorio pertenece al curso de electromagnetismo y su objetivo es estudiar el proceso de carga y descarga de un capacitor para, comparando con la ecuación teórica que describe el proceso, calcular el valor de su capacidad. Como los procesos de carga y descarga son continuos, no es posible con instrumentos analógicos medir en cada momento la tensión en el capacitor. Este problema se soluciona midiendo la constante de tiempo del circuito $\tau = RC$.

En el proceso de carga, τ es el tiempo que tarda en cargarse hasta el 63 % de la f.e.m. como puede calcularse a partir de la ecuación 1, que es la que rige el proceso.

$$V_C(t) = \epsilon (1 - e^{-\frac{t}{\tau}}), \quad (1)$$

En la descarga, considerando la ecuación del proceso:

$$V_C(t) = V_0 e^{-\frac{t}{\tau}}, \quad (2)$$

τ es el tiempo que tarda en llegar al 37 % del voltaje inicial.

Cuando las mediciones se hacen manualmente es necesario realizar un número grande de repeticiones del experimento para poder disminuir la componente tipo A de la incertidumbre.

El uso de Arduino hace el proceso más simple y preciso. Esto se debe a que el μc puede funcionar como f.e.m. por una salida digital y como voltímetro por una entrada analógica. El circuito montado se muestra en la Figura 2.

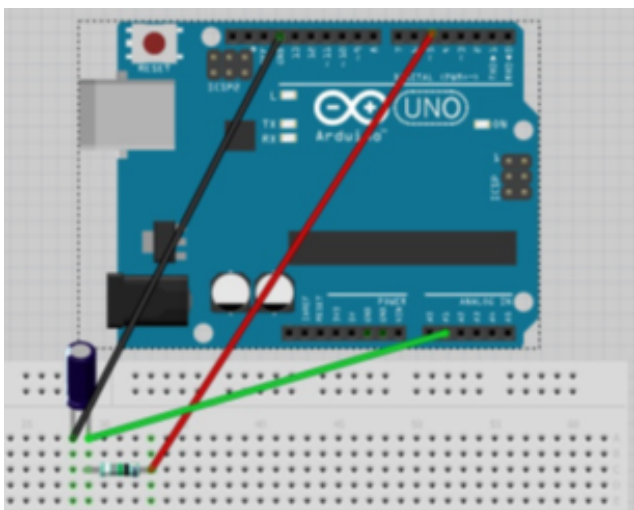


Figura 2. Modelo de prototipo para carga y descarga del capacitor (Rojo: 5V, Negro: GND, Verde: voltímetro). Véase el condensador en la esquina inferior izquierda.

Arduino puede realizar lecturas de voltaje en tiempos del orden de los milisegundos, lo que nos permite tomar

un gran número de puntos de voltaje como función del tiempo, tanto en carga como en descarga (Figura 3). Solo tenemos que decirle a la placa que si detecta diferencia de potencial en el capacitor al comenzar el proceso cierre el circuito por su interior para que se descargue a través de la resistencia. Un programa ejemplo se muestra en la información suplementaria. El programa se ejecuta de la siguiente forma.

Cuando se haya alcanzado el voltaje mínimo fijado (en este caso de 0.01 V) debe abrir el circuito convirtiendo su interior en una fuente de 5 V hasta que se alcance el voltaje máximo durante la carga (por ejemplo 4.8 V) y luego vuelve a cerrar su circuito para observar la descarga. Se fijaron estos valores límite porque teóricamente el tiempo en carga y descarga es infinito, lo que implica que el proceso puede ser innecesariamente largo.

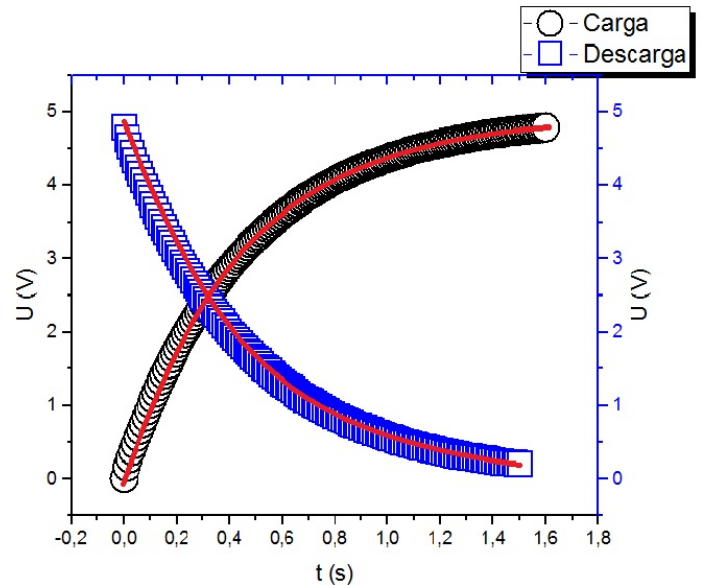


Figura 3. Voltaje vs tiempo registrado por Arduino en carga y descarga de un condensador. En ambos casos la línea continua representa el ajuste al modelo teórico.

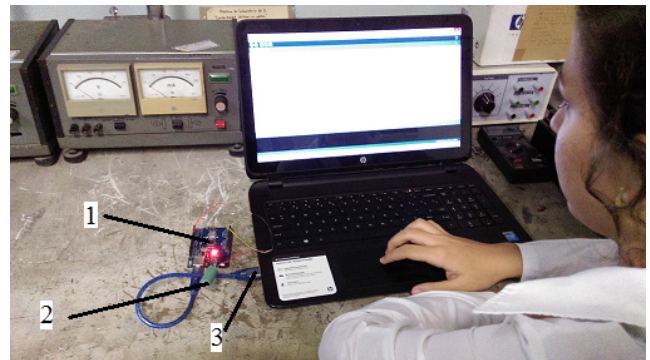


Figura 4. Montaje de la práctica en el momento de la realización. 1- Arduino funcionando, 2- Condensador, 3- Conexión USB Arduino – PC.

Los valores de tiempo se pueden recoger con la función *millis()*, que devuelve el tiempo transcurrido desde el inicio del programa. Con los datos recogidos en el monitor serial se puede hacer un ajuste a las funciones teóricas, ecuaciones 1 y 2 y a partir de los parámetros obtenidos hallar la capacidad del dispositivo con su incertidumbre.

Las mediciones se programaron con un intervalo de 10 ms, así, el Arduino tendrá tiempo suficiente para medir el voltaje. Con estos datos se obtienen valores de capacidad $C = 460(1) \mu\text{F}$ en la carga y $C = 477.4(6) \mu\text{F}$ en la descarga, comparables con los que se obtuvieron por otros métodos, incluyendo un multímetro profesional. Pero para realizar la práctica usando Arduino los estudiantes armaron el circuito, leyeron e interactuaron con el programa, capturaron los datos desde una computadora y los procesaron sin tener que tomar los datos de un instrumento.

La instalación es de una sencillez extrema, como se observa en la Figura 4.

II.6. Estudio de la luz polarizada

Esta práctica pertenece al laboratorio de óptica y su objetivo es la comprobación experimental de la Ley de Malus. Esta ley relaciona la irradiancia de la luz que emerge de un polaroide (I) con la irradiancia de la luz polarizada incidente (I_0) y el ángulo (θ) que forma el plano de vibración de la luz incidente con la dirección de polarización del polaroide:

$$I = I \cos^2 \theta \quad (3)$$

En la práctica el μc se acopla con un sensor de radiación visible (por ejemplo un fotodiodo) para medir la irradiancia de la luz que emerge. Es obvio que lo que se realiza es una medición relativa de la irradiancia, por lo que se debe calibrar la lectura del voltaje midiendo su valor a total oscuridad y a máxima iluminación.

II.7. Medición y control de magnitudes físicas

El control de diversos factores ambientales como la temperatura, la humedad y la iluminación (entre otros), es un aspecto fundamental en la vida profesional de la mayoría de los científicos, tanto para la realización de experimentos como para llevar registro de las condiciones físicas en interiores o exteriores [11, 12]. Es por eso que se propone una práctica de fin de ciclo de laboratorios de física que incluya la medición de varias magnitudes físicas simultáneamente y la emisión de señales que puedan ser utilizadas para el control. Para ello contamos con un Arduino y los sensores necesarios. En la práctica se utilizan un sensor de iluminación y otro de temperatura y humedad, pero obviamente hay múltiples posibilidades. Además por las salidas analógicas se emiten señales de voltaje respondiendo, por ejemplo, a la disminución de la iluminación por debajo de un umbral dado.

II.8. Otras prácticas de posible implementación

La versatilidad de Arduino y otros sistemas similares permite el diseño y montaje de prácticas de laboratorio que se acerquen mucho a las condiciones experimentales de los ambientes laborales más disímiles, dotando al estudiante de una herramienta casi universal de interacción y control

de dicho medio, que en el futuro pudiera convertirse en un elemento de incremento de la productividad del trabajo, no solo en el campo científico [12]. La unión de esta tecnología con las ideas del internet de las cosas [13] y la telefonía móvil [14] abren nuevas perspectivas para la experimentación cuyo límite es difícil de predecir [15–17]. Introducir estas técnicas en los laboratorios docentes es imprescindible, pudiendo resultar un elemento motivante para los estudiantes, además de ser una herramienta aplicable en los campos más disímiles, incluidas las ciencias sociales y de la conducta [18].

III. CONCLUSIONES

Las técnicas de automatización de experimentos con micro-controladores aportan a la enseñanza de la física experimental varios elementos que la hacen recomendable:

- Programar μc Arduino (vinculado con la programación en C, C++).
- Automatizar experimentos (nueva habilidad experimental).
- Familiarizarse con una tecnología novedosa, cada vez más utilizada en la ciencia y la técnica. Lo anterior redundará en nuevas competencias profesionales del graduado.

REFERENCES

- [1] R. Kwock, Field Instruments: Build it yourself, Nature 545, 253 (2017).
- [2] www.arduino.cc visitada el 29 – 05 – 2017.
- [3] Carrera de Física Nuclear, Plan de Estudios E. Ministerio de Educación Superior, Cuba (2017).
- [4] C. Vandeveld, F. Wyffels, B. Vanderborght, J. Saldien, Do-It-Yourself Design for Social Robots: An Open-Source Hardware Platform to Encourage Innovation, IEEE Robot. Autom. Mag. 24, 86 (2017).
- [5] Mejores alternativas a Arduino: del Do it Yourself al Internet de las Cosas. <https://bbvaopen4u.com/es/actualidad/mejores-alternativas-arduino-del-do-it-yourself-al-internet-de-las-cosas>. Consultado el 06/06/17.
- [6] J. M. Ruiz-Martín El crecimiento de los open sources de fabricación digital y su implementación en el media lab. De la high-tech al do it yourself. Revista Científica de Comunicación, 6, 67 (2015).
- [7] <http://www.atmel.com/products/microcontrollers/avr/default.aspx?tab=documents>, consultado el 12/10/17.
- [8] <https://www.arduino.cc/en/Guide>, <https://www.arduino.cc/en/Main/Software>, bajados el 16/06/17.
- [9] J. Purdum, Beginning C for Arduino. Apress Ed. (2012) ISBN 978-1-4302-4777-7.
- [10] M. Margolis, Arduino cookbook. (O'Reilly Ed. Cambridge) Second Edition (2012).

- [11] S. D. Hicks, A. K. Aufdenkampe, D. S. Montgomery. Sensor Networks, Dataloggers, and Other Handy Gadgets Using Open-Source Electronics for the Christina River Basin. CZO. AGU2011. <http://www.stroudcenter.org/research/projects/czo/arduino.shtm>
- [12] Joshua M. Pearce, Building Research Equipment with Free, Open-Source Hardware, *Science* 337, 1303, (2012).
- [13] D. De Roeck, K. Slegers, J. Criel, M. Godon, L. Claeys, K. Kilpi, A. Jacobs, I would DiYSE for it!: a manifesto for do-it-yourself internet-of-things creation. Proceeding NordiCHI '12. Proceedings of the 7th Nordic Conference on Human-Computer Interaction: Making Sense Through Design. Copenhagen, Denmark - October 14 - 17, 2012 ACM New York, NY, USA (2012). Pages 170-17.
- [14] A. D. Wickert, The ALog: Inexpensive, Open-Source, Automated Data Collection in the Field. *Bull. Ecol. Soc. Am.*, 95, 166 (2014).
- [15] H. Gali. An Open-Source Automated Peptide Synthesizer Based on Arduino and Python. DOI: 10.1177/2472630316685844, *SLAS TECHNOLOGY: Translating Life Sciences Innovation*. Online ISSN: 2472-6311
- [16] C. Anderson. In the Next Industrial Revolution, Atoms Are the New Bits. *Wired* Date of Publication: 01.25.10. <https://www.wired.com/2010/01/ff.newrevolution/>, consultado 06/06/2017.
- [17] A. A. Gadlima, Arduino as a learning tool. 11th International Conference on Electronics, Computer and Computation (ICECCO), (2014) DOI: 10.1109/ICECCO.2014.6997577
- [18] A. D'Ausilio, A low cost, multipurpose lab equipment. *Behav. Res.* 44, 305 (2012).

Er:YAG POLYCRYSTALLINE CERAMICS: USE OF SiO_2 AND B_2O_3 AS SINTERING ADDITIVES AND THEIR EFFECTS ON THE OPTICAL AND STRUCTURAL PROPERTIES

CERÁMICAS POLICRISTALINAS DE Er:YAG. EL USO DE SiO_2 Y B_2O_3 COMO ADITIVOS DE SINTERIZACIÓN Y SUS EFECTOS EN LAS PROPIEDADES ÓPTICAS Y ESTRUCTURALES

L. MOREIRA^{a,b}, L. PONCE^{a†}, E. DE POSADA^a, T. FLORES^a

a) Instituto Politécnico Nacional Cicata Altamira, Altamira, Tamps., Mexico 89600

b) TECNO-INSPEC S.A. de C.V., Tampico, Tamps., Mexico 89260; guira_98@yahoo.com[†]

† corresponding author

Recibido 21/3/2017; Aceptado 23/10/2017

The effects of SiO_2 and B_2O_3 as sintering additives on the optical and structural properties of Er:YAG polycrystalline ceramics sintered without additional external pressure and in a high vacuum were investigated. The optimum optical and structural properties were obtained by doping the ceramics with 0.5 % of SiO_2 and 0.17 wt. % of SiO_2 , and 0.33 wt. % of B_2O_3 ($\text{B}^{3+}:\text{Si}^{4+} = 2.0$), respectively, with the former giving the better results. Alternatively, it is shown that through the addition of B_2O_3 , it is possible to reduce the sintering temperature and obtain good density values.

En el trabajo se investigan los efectos de aditivos de sinterización como el SiO_2 y el B_2O_3 , en las propiedades ópticas y estructurales de cerámicas policristalinas de Er:YAG sinterizadas en alto vacío sin aplicar presión externa. La mejor calidad óptica y estructural se obtuvo dopando las cerámicas con 0.5 % de SiO_2 , 0.17 % de SiO_2 and 0.33 % de B_2O_3 ($\text{B}^{3+}:\text{Si}^{4+} = 2.0$) respectivamente. Por otra parte, se demuestra que con la adición de B_2O_3 es posible reducir la temperatura de sinterizado y obtener valores de densidad adecuados.

PACS: Microstructure crystals, 61.72.-y; Ceramics fabrication, 81.05.Je, 81.05.Mh; Laser materials, 42.70.Hj

I. INTRODUCTION

Yttrium aluminum garnet (YAG) is one of the most attractive and studied materials for laser applications due to its excellent optical, thermal, mechanical and spectroscopic properties [1,2]. Because of its birefringence-free cubic crystal structure, transparent polycrystalline ceramics with densities of up to 99.99 % can be produced by sintering.

The manufacturing of translucent ceramics started in the 1950s. Coble was the first to demonstrate that ceramics could be sintered to a translucent/transparent state with high densities, thus reducing or eliminating light scattering from residual porosity and second phases [3,4]. This, along with the discovery of the ruby laser in 1960 [5] allowed Hatch et al. [6] to start using $\text{Dy}^{2+}:\text{CaF}_2$ ceramics in cryogenic conditions as an active laser medium in 1964. For four decades, ceramics were used in laser applications, however, their optical properties and laser efficiency could not achieve the desired values [7,8]. In 1995, Ikesue et al. [9] first reported Nd:YAG transparent polycrystalline ceramics with a high laser efficiency fabricated by sintering mixed Y_2O_3 , Al_2O_3 and Nd_2O_3 powders at 1750°C for 8 h. They found that adding SiO_2 as a sintering additive was critical to sintering transparent Nd:YAG, proposing that SiO_2 plays a key role in the incorporation of Nd^{3+} ions into the YAG lattice. Afterwards, Yagi et al. [10,11] developed another method to obtain Nd:YAG transparent ceramics by sintering co-precipitated Nd:YAG nanometric powder doped with SiO_2 at 1700°C. With these methods, several transparent

ceramics, such as Nd:YAG [12], Er:YAG [2] and Yb:YAG [13], have been fabricated.

In 2007, Sallé et al. [14] noted that small silica additions improved the densification kinetics and inhibited abnormal grain growth in the final sintering stage. Boulesteix et al. [15], using SiO_2 as a sintering additive, demonstrated the liquid-phase sintering mechanisms in Nd:YAG [16] and revealed that when obtaining Nd:YAG ceramics, SiO_2 addition increased Nd^{3+} diffusion tenfold [15]. Other reports have shown the beneficial effects of SiO_2 in the sintering process due to the increase in the grain boundary diffusion coefficient or the decrease in grain boundary surface energy in the presence of second phases [17–19], indicating that the effect of silica is also linked to the formation of a solid solution by replacing Al^{3+} with Si^{4+} at the tetrahedral sites. Such a transformation leads to Y^{3+} vacancy formation that can improve the network diffusion coefficient, therefore improving the YAG densification kinetics. It is clear that SiO_2 acts as a transient liquid-phase sintering additive during YAG sintering. Specifically, a liquid-phase is formed at 1390°C and affects densification in intermediate states, followed by the replacement of Si^{4+} within the YAG lattice, leading to densification by solid-state mechanisms.

Even though the important contribution of SiO_2 as a sintering additive has been recognized, it has also been identified as the cause of optical defects, including second phase particles [15] and color centers in ceramics and monocrystals [20]. Also, after the annealing process there are always Si-rich particle phases in YAG ceramics doped with SiO_2 , which affects their

transparency [21]. In addition, Si-rich particle phases tend to precipitate from YAG ceramics at high temperatures for a prolonged period of time [22].

Thus, minimizing the sintering additives used in the ceramic process continues to be a challenge [23]. Recently, Stevenson et al. [24] obtained Nd:YAG transparent ceramics doped with B_2O_3 - SiO_2 , in which the SiO_2 levels were reduced to 0.112%. Alternatively, using B_2O_3 in glass ceramics allows densification to occur before crystallization [25], thereby decreasing the crystallization temperature [26] and promoting nucleation [27]. Similarly, in spinel-type ceramics, B_2O_3 has proven to be useful in obtaining adequate transparency [28]. Based on the above, and considering that we could not find any previous studies regarding the use of B_2O_3 in Er:YAG ceramics and that there are few reports regarding SiO_2 as a sintering additive, the present work studies the effect of SiO_2 and B_2O_3 , when used as sintering additives, on the optical and structural properties of Er:YAG ceramics.

II. EXPERIMENTAL

The raw materials used to obtain Er:YAG ceramics through a solid-state reaction and vacuum sintering were high-purity commercial powders of $\alpha-Al_2O_3$ (> 99.99%, $D_{50} \approx 1125$ nm, Baikowski Japan Co, LTD, Chiba, Japan), Y_2O_3 (> 99.99%, $D_{50} \approx 1115$ nm, Baikowski Japan Co, LTD, Chiba, Japan) and Er_2O_3 (> 99.99%, $D_{50} \approx 50$ nm, Sigma-Aldrich, USA). As sintering additives, tetraethyl orthosilicate (TEOS, > 99.999%, Sigma-Aldrich, USA) and trimethyl borate (TRBO, > 99.5%, Sigma-Aldrich, USA) were used as SiO_2 and B_2O_3 , respectively. Oxide powders and sintering additives were mixed in stoichiometric proportions of 2.0 at. % of Er:YAG with 0.5 wt. % of TEOS as a sintering aid. The resulting powders were synthesized and a green compact was formed, according to a procedure described elsewhere [29].

The obtained green compacts were sintered in a high vacuum ($< 10^{-3}$ Pa) at 1550°C for 12 h using an oven designed and built for this purpose [29]. In order to study the sintering kinetics, the green compacts were sintered at three different temperatures for 12 h: 1450, 1500 and 1550°C.

The ceramic microstructures were observed by scanning electron microscopy (SEM, model JSM-7500F, JEOL, USA) and atomic force microscopy (AFM, model TT-AFM, AFM Workshop, USA). For the SEM measurements, ceramics were previously polished using an accelerating voltage of 3.0 kV. AFM measurements were made before and after polishing. Each sample was analyzed in three different areas with a scanning area of $40 \times 40 \mu m^2$. The densities of the ceramics were measured using the Archimedes' method, using deionized water as an immersion medium. Determination of the grain size of the sintered samples was carried out using the linear intercept method [30]. The mean grain size was calculated by multiplying the average linear intercept distance by 1.56 [31].

X-ray diffraction (XRD) was performed using the grazing incidence configuration with the incident beam at 1.5° (X

Pert PRO MRD, PANalytical).

Transmittance of the Er:YAG ceramics was measured by a USB4000+ spectrometer, supplied by Ocean Optics with a tungsten halogen light source (360–2400 nm, model LL, Ocean Optics, USA).

III. RESULTS AND DISCUSSION

III.1. Powder preparation

In our previous work [29], it was demonstrated that the bimodal distribution of the starting powder particles further improves, compared with monomodal distributions, the density of Er:YAG ceramics and thus, their structural and optical properties. The optimum result was obtained for the bimodal distribution resulting from mixing two monomodal distributions (1:4) with an average particle size ratio of 2:1.

On this basis, synthesized powders were processed in order to obtain, for each one, a grain size distribution according to the particle size distribution (Figure 1). For this, powders were selected using sieves of 200, 250 and 325 mesh. We obtained two powder partial distributions for each synthesized powder: P1 were those between 200 and 250 mesh, and P2 were those between 250 and 325 mesh. Both P1 and P2 experienced an average size ratio of $SiO_2/m2 : 1$. Finally, partial distributions were mixed in a 1:4 ratio, resulting in the starting powders used in each sample of interest.

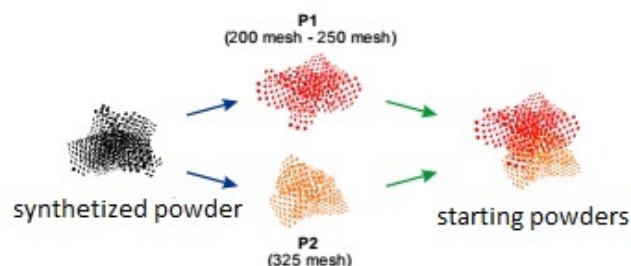


Figure 1. Process for obtaining the final powders required to fabricate Er:YAG ceramics from two partial distributions of the resulting powders synthesized from oxides and initial additives.

Table 1. Samples with their respective wt. % used.

Sample	TEOS (wt. %)
T00	0.0
T02	0.2
T03	0.3
T04	0.4
T05	0.5
T06	0.6

III.2. SiO_2 and its effect on Er:YAG ceramics

SiO_2 is crucial for the ceramic sintering process for optical applications, however, there are few studies reporting its effect on the structure and optical properties of Er:YAG

ceramics. This is also a starting point to study the influence of B_2O_3 - SiO_2 on such properties. Table 1 shows a summary of the samples and additives used. For nomenclature purposes, samples were classified with numbers and letters, letters stand for additives, which in this case is TEOS, and the number represents the quantity in wt. % that was used.

Figure 2 shows the XRD pattern of sample T00 after sintering at 1550°C for 12 h. As shown, the characteristic peaks of the ceramics can be indexed to the YAG garnet-like cubic structure (YAG, ICSD: 98-004-1144). The same result was obtained for each sample. Thus, we can conclude that complete YAG transformation occurred during the vacuum sintering process, regardless of the quantity of additive used.

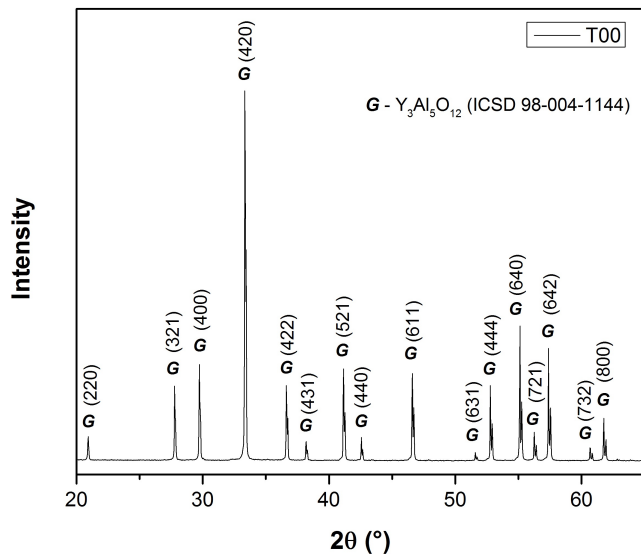


Figure 2. XRD pattern of the ceramic sample T00 sintered at 1550°C for 12 h. The identified phase is G ($Y_3Al_5O_{12}$).

Figure 3 shows the behavior of the relative density of ceramic samples T00 to T06. An increase in the TEOS concentration causes higher densification of the ceramics, with samples T05 (94.95 %) and T06 (95.00 %) having the highest densities. Even though sample T06 with 0.06 wt. % TEOS is the densest, there is only a slightly difference when compared with sample T05 with 0.05 % TEOS. The rest of the samples experience different behavior. Sample T00, which was sintered without any additive, is the least dense.

Figure 4 shows the transmittance of ceramic samples T00 to T06 in terms of their respective relative densities. The results show an increase of transmittance with the improvement of the ceramics' relative density. With the exception of sample T06 and based on the results shown in Figure 3, an increase in the TEOS concentration results in better optical properties. This result is consistent with previous studies of Nd:YAG ceramics [19]. Sample T05 presents the best transmittance, and the obtained value is similar to the one reported by Ikesue et al. [32].

Sample T06, despite it was the densest, its transmittance was the highest. Note the direct relationship between the ceramics' density and its optical properties, considering that

density is related to the elimination of porosity in compact powders in order to form a solid material that is essentially pore-free, since these are a fundamental source of light scattering [30].

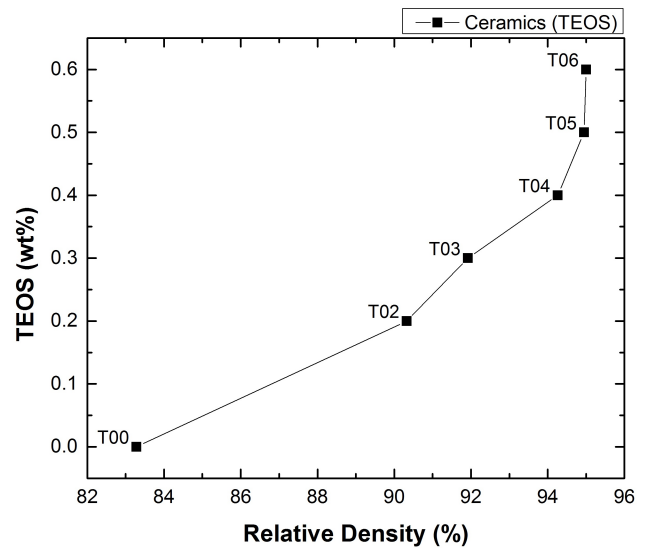


Figure 3. Relative density of ceramic samples T00 to T06 sintered at 1550°C for 12 h.

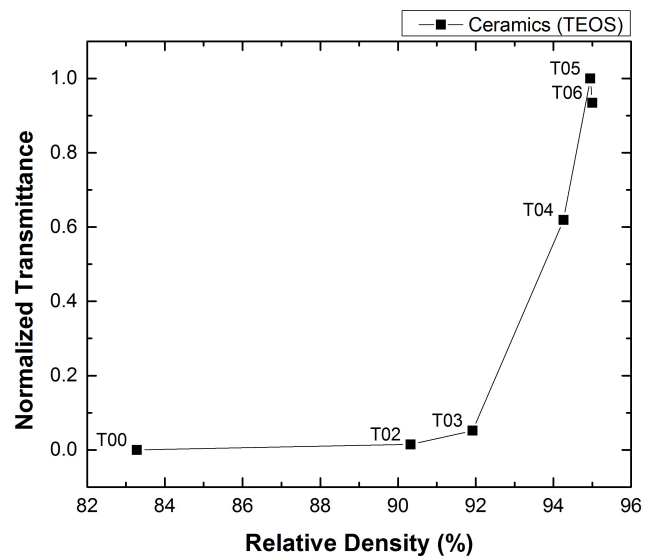


Figure 4. Transmittance of samples T00 to T06 in terms of relative density, sintered at 1550°C for 12 h.

Figure 5a shows the AFM images of samples T00, T05 and T06 after being polished. Regarding the less dense sample T00 (Figure 3), its structure shows a marked increase in grain growth, characterized by heterogeneous microstructures, in which there are no sintering additives. Samples T05 and T06 present a more homogeneous grain structure and a better conformation can be observed. Even though sample T06 presents better results, some asymmetry in the structure can be observed and it is characterized by larger grains in the lower half and smaller grains towards the upper half. This behavior is not observed in any other sample. Figure

5b shows the grain size distribution. From their calculated geometric standard distributions (GSD), ρ_g , which give a measure of grain-size homogeneity, an improvement in the structure with an increase in the concentration of TEOS can be observed. Regarding the shape of the size distributions, for sample T06, there is a marked bimodal distribution, in which the transition between large and medium is not entirely smooth. This can cause the formation of zones with greater and lesser density in the ceramic structure, therefore generating stress, resulting in a negative impact on the optical properties (Figure 4).

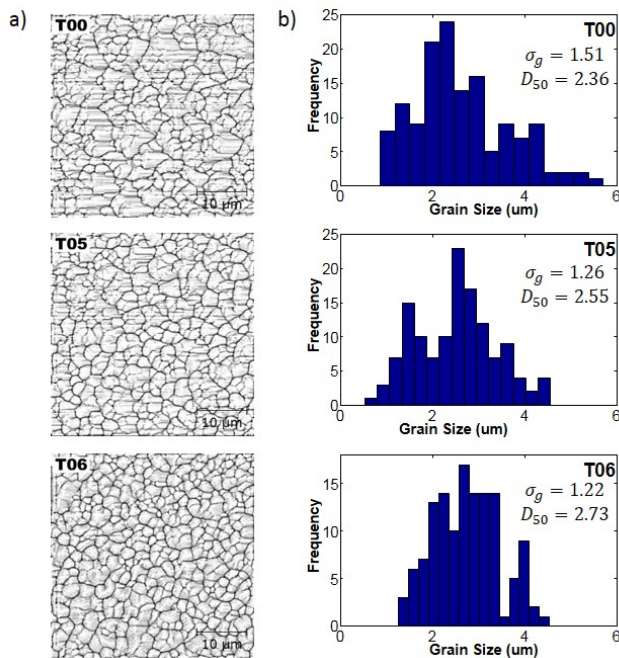


Figure 5. AFM images of ceramic samples T00, T05 and T06 sintered at 1550°C for 12 h and their respective grain size distributions. The analysis was carried out after the ceramics had been polished.

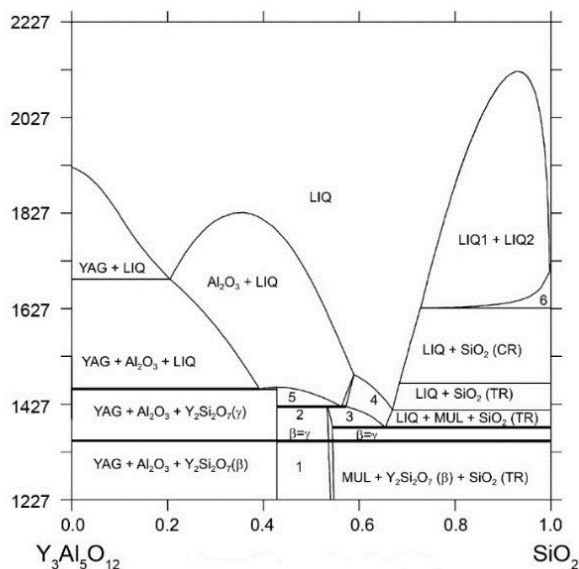


Figure 6. Phase diagram of $Y_3Al_5O_{12}$ - SiO_2 [29].

According to the YAG- SiO_2 phases diagram [33] shown in

Figure 6, a liquid-phase is produced in the matrix of the YAG doped with SiO_2 above 1400°C. Thus, improvement in the density of ceramics doped with SiO_2 may be a consequence of the liquid-phase sintering, as proposed by Boulesteix et al. [16] in Nd:YAG ceramics.

Figure 7a and b shows the SEM images of ceramic samples T05 and T06, where the formation of Si-rich second phases can be observed, corresponding to 1: $SiO_2 + Al_2O_3$ and 2: $SiO_2 + Y_2O_3 + Al_2O_3$, and the main phase 3: $Er_{0.06}Y_{2.94}Al_5O_{12}$. The formed phases, as a consequence of the liquid-phase residues that are formed at temperatures over 1400°C [34], corroborate the Er:YAG ceramic densification by liquid-phase sintering mechanisms.

Even though Si-rich phases must activate and promote densification during sintering, an excess can affect the ceramics' optical properties [30]. In the case of ceramic T06 (Figure 7b), an excess of SiO_2 causes marked second phases with a higher concentration, which are the main cause of the detriment of the ceramics optical and structural properties (Figures 7a and 7b). Regarding sample T05 (Figure 7), despite presenting second phases, it also experiences the best transmittance. This result shows that it is possible to obtain ceramics with interesting optical properties even in the presence of second phases. A similar report has been published by Liu et al. [35] for Er:YAG ceramics.

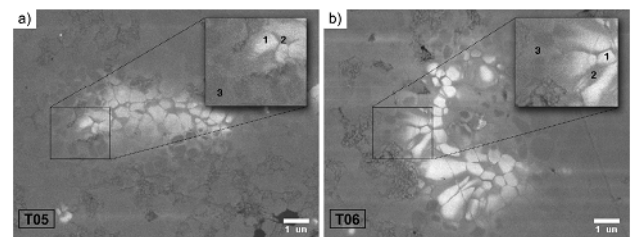


Figure 7. SEM images of ceramic samples T05 and T06 sintered at 1550°C for 12 h. The identified phases correspond to 1: $SiO_2 + Al_2O_3$, 2: $SiO_2 + Y_2O_3 + Al_2O_3$ and 3: $Er_{0.06}Y_{2.94}Al_5O_{12}$.

III.3. Influence of B_2O_3 on Er:YAG ceramic sintering

Even though the contribution of SiO_2 as a sintering additive is important, it has been proven to have secondary effects on the optical and structural properties of Er:YAG ceramics (Figure 7). In order to minimize the use of SiO_2 , B_2O_3 was incorporated as a sintering additive using TRBO. For this, sample T05 was used as a reference, since it was the sample with the best optical properties and presented second phases in its structure.

For every sample, the total amount of additive was assumed to be equal to that of sample T05 at 0.5 wt. %. The TRBO:TEOS ($B^{3+}:S^{4+}$) ratio varied from 0.0 to 2.0. A certain nomenclature, consisting of one letter and two numbers, was used for samples doped with B_2O_3 - SiO_2 . Letter "B", indicates the presence of B_2O_3 as an additive, and the numbers indicate the $B^{3+}:S^{4+}$ ratio of sintering additives used in the sample. Thus, B20 represents a sample with 2 at. % Er:YAG with a $B^{3+}:S^{4+}$ ratio of 2.0 (0.33 wt. % TRBO:0.17 wt. % TEOS = 2.0).

Table 2 summarizes the characteristics of the samples used with the amount of sintering additives used.

Table 2. Composition of the samples using TEOS and TRBO as sintering additives for the fabrication of 2 at. % Er:YAG ceramics.

Sample	T05	B05	B10	B15	B20
Total: TEOS+	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
TEOS (wt. %)	0.50	0.33	0.25	0.20	0.17
TRBO (wt. %)	0.00	0.17	0.15	0.30	0.33
TRBO: TEOS	0.0	0.5	1.0	1.5	2.0

Figure 8 shows the relative density of the ceramics in terms of the $B^{3+}:S^{4+}$ ratio, whilst maintaining the total amount of additive equal to 0.5 wt. %. As observed, an increase in $B^{3+}:S^{4+}$ causes a progressive improvement of the ceramic's relative density. Using sample T05 as a reference, doped only with SiO_2 , with the increase of B_2O_3 and the decrease of SiO_2 , it starts to yield better results from the $B^{3+}:S^{4+}$ ratio = 0.25 : 0.25 = 1.0.

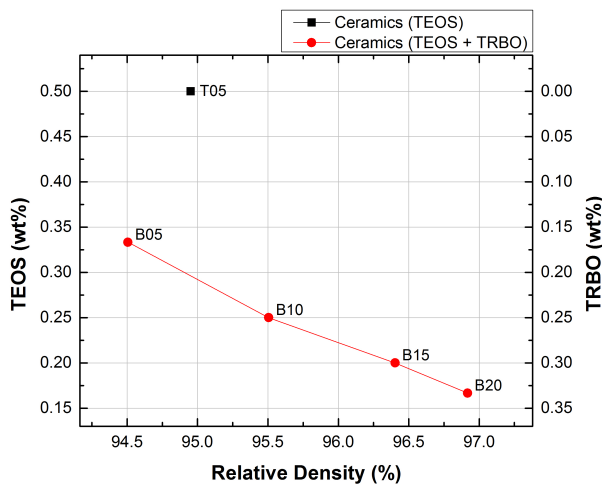


Figure 8. Density of the ceramics sintered at 1550°C for 12 h in terms of the Si^{4+} and B^{3+} concentration. The $B^{3+}:S^{4+}$ ratio varies from 0.0 to 2.0, whilst maintaining the total amount of additive equal to 0.5 wt. %.

Figure 9 shows AFM images of the ceramics after being polished and their respective grain size distributions. In Figure 9a, it can be observed that the structure becomes more uniform as the $B^{3+}:S^{4+}$ ratio increases. For the less-dense samples T05 and B06, some abnormal grain size growth was observed. This was more pronounced in the sample B05, which is the one with the lower density.

Using the results shown in Figure 9b, Figure 10 shows the GSD behavior and the average grain size of ceramics T05 and B05 to B20 in terms of their relative density. As can be observed, the average grain size varies from 2.29 to 3.00 μm , regardless of the ceramic's density value and the $B^{3+}:S^{4+}$ ratio. The GSD, opposite to the grain size behavior, decreases as the density and $B^{3+}:S^{4+}$ ratio increase. This result is consistent with the structure's homogeneity, which can be observed in Figure 9a. Ceramics B15 and B20 showed the best results, and were also the samples with the higher density and lower

amount of SiO_2 , respectively (Figure 8).

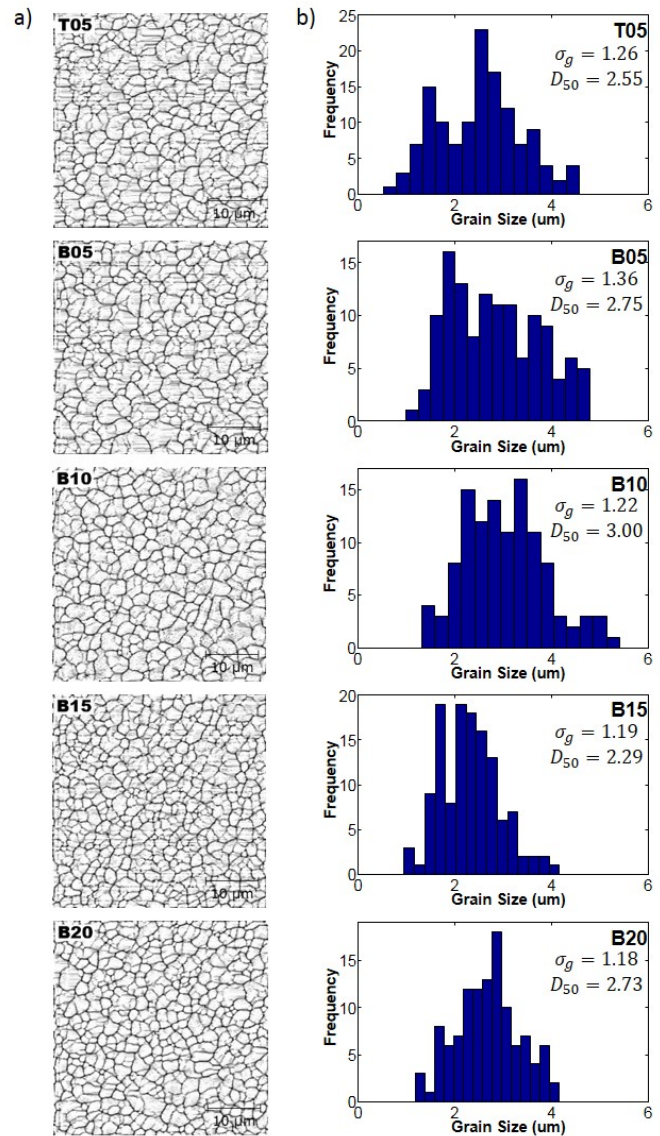


Figure 9. AFM images of ceramics T05 and B05 to B20 sintered at 1550°C for 12 h and their respective grain size distributions. The analysis was carried out after the ceramics had been polished.

Figure 11 shows the relative density of the ceramics sintered between 1450 and 1550°C for 12 h. The sintering kinetics at different temperatures reveal an increase in the densification of the samples doped with B_2O_3 (B05 to B20) regarding the sample doped only with SiO_2 (T05). At low temperatures, such as 1450 and 1500°C, the difference in the density between the samples doped with B_2O_3 and the sample doped only with SiO_2 becomes substantial. Using samples T05 and B20 as references, the difference in density corresponds to 13.00 %, 6.76 % and 1.97 % at 1450, 1500 and 1550°C, respectively. In optical terms, such differences are extremely decisive for the final optical properties [36,37]. Similarly, using B_2O_3 reduces the sintering temperature of the ceramics while maintaining or improving the ceramic's density values. Note that, for example, ceramic B20 obtained at 1450°C experienced a better density than ceramic T05 obtained at 1500°C. Also, ceramic B20 at 1500°C experienced similar densities to ceramics T05

and B05 sintered at 1550°C. In every case, the temperature difference is 50°C.

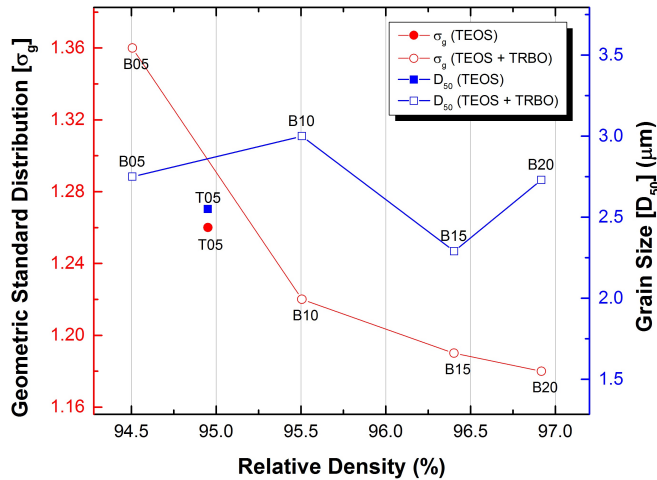


Figure 10. GSD (ρ_g) and average grain size (D_{50}) corresponding to ceramic samples T05 and B05 to B20 in terms of their respective relative densities.

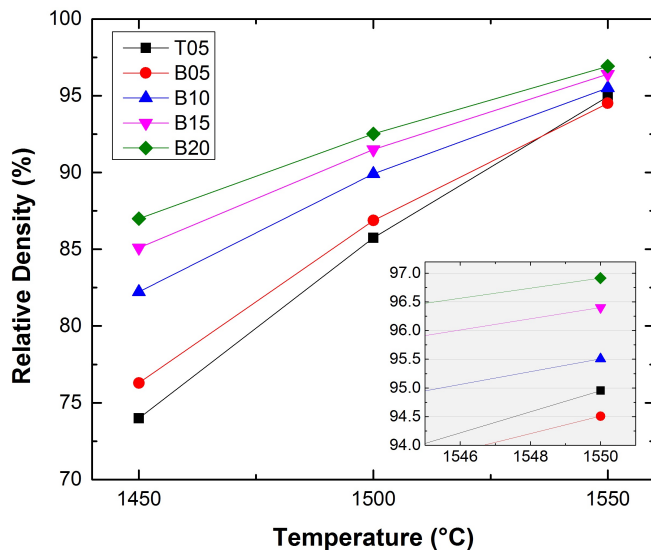


Figure 11. Relative density of ceramic samples T05 and B05 to B20, sintered for 12 h at different temperatures.

Figure 12 shows the normalized transmittance of ceramics T05 and B05 to B20 doped with SiO_2 , and $\text{B}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ respectively. An increase in the $\text{B}^{3+}:\text{S}^{4+}$ ratio implies a considerable improvement in the ceramics' optical properties. This result is consistent with the values and behaviors of the densities shown in Figures 8 and 11, considering that a material's density is directly related to its porosity and, in turn, pores constitute the main source of light scattering in the material [9].

According to the literature [38], additives should reduce the anisotropy of crystal growth and make its shape more isometric. Otherwise, anisotropy would lead to the generation of tensile forces in the ceramics, causing inter-crystalline porosity. Note that the shape and homogeneous distribution of the grains (Figures 9 and 10) result in better optical properties (Figure 12) with the increase of the $\text{B}^{3+}:\text{S}^{4+}$ ratio.

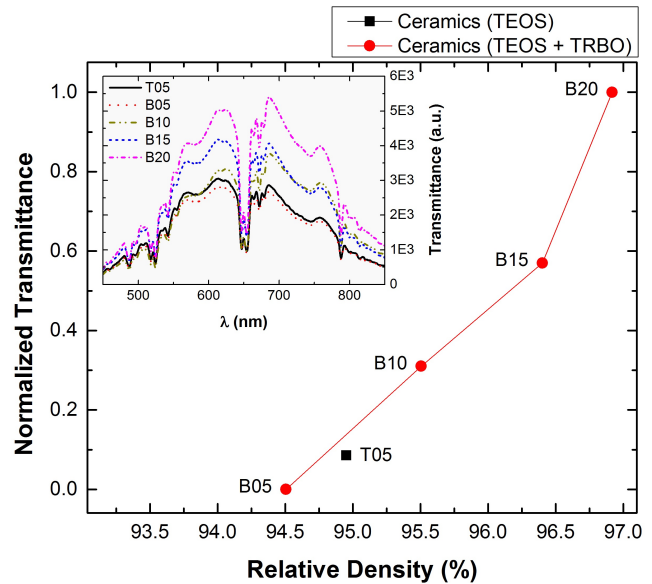


Figure 12. Normalized transmittance of the ceramics of 2 at. % Er:YAG, T05 and B05 to B20, doped with $\text{B}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$, and sintered at 1550°C for 12 h. The inserted graphic corresponds to the respective transmittance spectra of the ceramics within a spectral range of 450–850 nm.

Figure 13a–c shows the SEM images of ceramic samples T05, B10 and B20 after being polished and sintered at 1550°C for 12 h. As can be observed, for a total additive amount of 0.5 wt. %, an increase in the B_2O_3 amount and a decrease in the SiO_2 amount, results in the formation of less second phases in the ceramic structure. Thus, transmittance of the ceramics is favored (Figure 12), if we consider that grain boundary phases constitute one of the fundamental mechanisms that affect the ceramics' optical properties [39]. Figure 13d shows a SEM image of the sample B20 sintered at 1550°C for 18 h. Both, the amount and type of additives used and the sintering time, contribute to a better sintering process, where it is possible to obtain a homogeneous structure free of second phases.

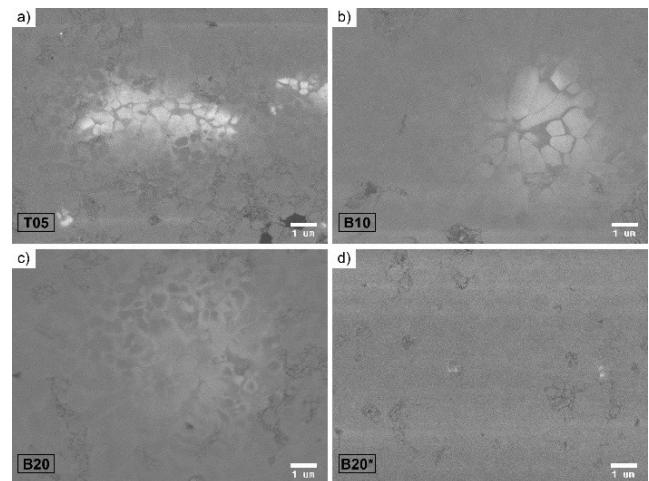


Figure 13. SEM images of the ceramic samples a) T05, b) B10 and c) B20 sintered at 1550°C for 12 h and d) ceramic B20* corresponding to sample B20 sintered at 1550°C for 18 h.

Figure 14 shows the substantial improvement of the optical properties of sample B20, with 0.33 wt. % TRBO and 0.17

wt.% TEOS, when sintered at 1550°C for 12 and 18 h, respectively.

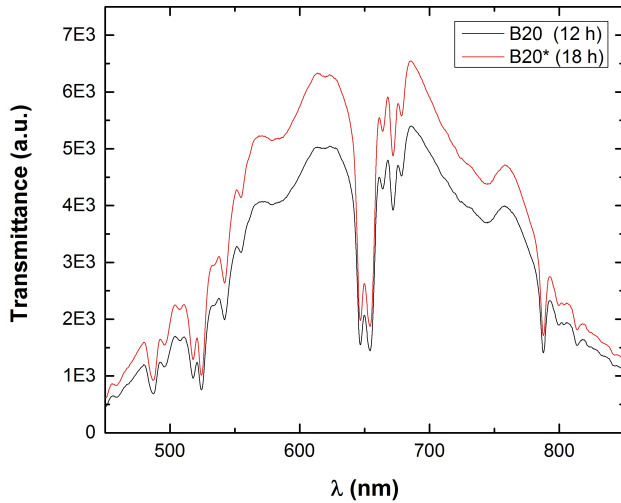


Figure 14. Transmittance of sample B20, sintered at 1550°C for 12 and 18 h, respectively.

In order to study the effect of sintering additives in the ceramics, an XPS analysis was carried out. Figure 15 shows the characteristic spectra of samples T05, B10 and B20, along with the wt.% of the representative components present in each sample shown in the table. In the case of Er(4d), Y(3d), Al(2p) and O(1s), fundamental components in the formation of Er:YAG ceramics, these remain virtually constant. Regarding Si(2p), its depletion is clearly shown as the $B^{3+}:S^{4+}$ ratio increases. In the case of B(1s), it cannot be detected, not even in ceramic B20, to which was initially added the highest amount of B_2O_3 prior to the sintering process (Table 2). This may be due to vaporization of B(1s) during the sintering process at 1550°C for 12 h. Other studies, in other circumstances, have also shown volatilization of B [40].

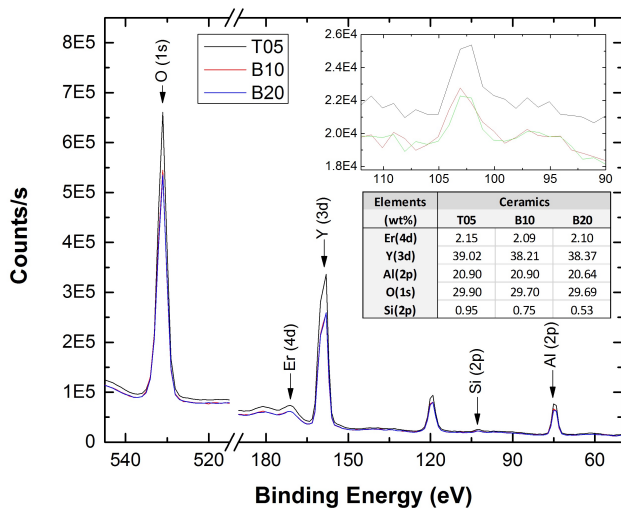


Figure 15. XPS spectra corresponding to ceramic samples B00, B10 and B20 sintered at 1550°C for 12 h.

B_2O_3 , among its physical properties, presents a melting point above 450°C [26]. In the sintering process of Er:YAG

ceramics using B_2O_3 - SiO_2 additives, the formation of Si-rich second phases was observed, which is typical in the liquid-phase sintering process (Figure 16). Alternatively, in the temperature range in which Er:YAG ceramics were sintered (1450–1550°C), the XPS analysis regarding the ceramics' composition never determined the presence of B(1s) in their structure once they were sintered at 1550°C for 12 h. As previously stated, the volatilization of B during the sintering process has been reported [40]. The previous work confirms the contribution of B_2O_3 - SiO_2 as sintering additives, which favors the liquid-phase sintering mechanisms.

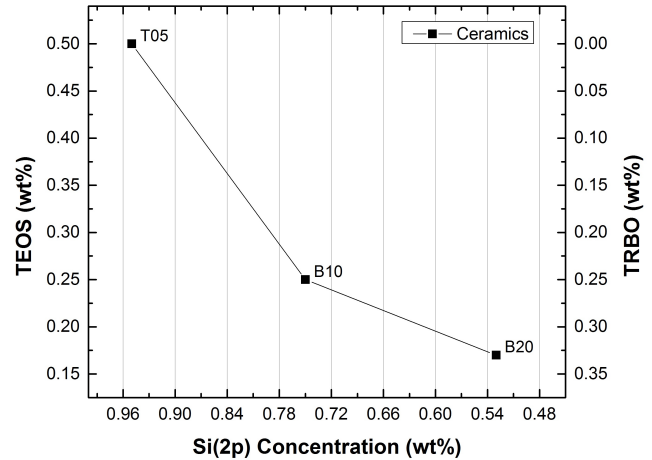


Figure 16. Si(2p) concentration in terms of the B_2O_3 :TEOS ratio in Er:YAG ceramics sintered at 1550°C for 12 h.

Know and Messing [41] created equation 2 to describe densification in diffusion limited densification in liquid phase sintering systems:

$$\frac{\partial \rho}{\rho_0 \partial t} \sim \frac{24\pi E(\rho) D_{liq} \delta_{liq}}{\beta_c^2 k_B T r^2} \quad (1)$$

where $E(\rho)$ is a density dependent function, D_{liq} the liquid phase constant, δ_{liq} the thickness of the liquid-phase layer, β_c the fractional area between particles, k_B the Boltzmann's constant, T the temperature and r the mean particle radius.

According to the Stokes-Einstein equation (2):

$$D_{liq} = \frac{k_B T}{6\eta r} \quad (2)$$

where D_{liq} is the diffusion constant for an ion diffusion in a liquid, η the viscosity and r is the atomic radius of the diffusing ion. Diffusion in a liquid is inversely proportional to the melting viscosity. Thus, an increase in densification and optical properties as a consequence of B^{3+} ions is related with decrease in viscosity in the liquid-phase during sintering, which, therefore, increases D_{liq} and the associated sintering kinetics by a liquid-phase sintering mechanism. Use of B_2O_3 as a sintering additive substantially contributes to the improvements of the Er:YAG ceramic's optical and structural properties.

IV. CONCLUSIONS

Using SiO_2 and B_2O_3 as sintering additives, Er:YAG polycrystalline ceramics were obtained. We demonstrate that the use of such additives in the manufacturing process of Er:YAG ceramics, sintered without external pressure and in high vacuum, substantially improves their structural and optical properties. The fundamental densification mechanism in ceramics is the liquid-phase sintering.

The use of B_2O_3 reduced the amount of SiO_2 additive and thus, the formation of Si-rich second phases that affect the ceramics' optical properties. Best optical and structural properties were obtained doping the ceramics with 0.5 % of SiO_2 and 0.17 wt. % of SiO_2 , and 0.33 wt. % of B_2O_3 ($\text{B}^{3+}:\text{Si}^{4+}=2.0$), respectively.

Through the addition of B_2O_3 , it is also possible to reduce the sintering temperature while obtaining good density values. In the studies made and for the temperature range used, a reduction of 50°C is reported resulting in similar or better density values.

ACKNOWLEDGMENTS

We acknowledge the SIP-IPN 2016-1804/0291 project and SIBE, EDI and SNI grants for financial support.

REFERENCES

- [1] J. Dong, A. Shirakawa, K.-i. Ueda, H. Yagi, T. Yanagitani, and A. A. Kaminskii, *Appl. Phys. Lett.* 89, 091114 (2006).
- [2] N. Ter-Gabrielyan, L. Merkle, E. Kupp, G. Messing, and M. Dubinskii, *Opt. Lett.* 35, 922 (2010).
- [3] R. Coble, *Am. Ceram. Soc. Bull.* 38, 507 (1959).
- [4] R. L. Coble, *J. Appl. Phys.* 32, 793 (1961).
- [5] T. H. Maiman, *Nature* 187, 493 (1960).
- [6] S. Hatch, W. Parsons, and R. Weagley, *Appl. Phys. Lett.* 5, 153 (1964).
- [7] C. Greskovich and J. Chernoch, *J. Appl. Phys.* 44, 4599 (1973).
- [8] C. Greskovich and J. Chernoch, *J. Appl. Phys.* 45, 4495 (1974).
- [9] A. Ikesue, Japanese patent 3 (1992).
- [10] Y. Takakimi, Y. Hideki, and Y. Hiroo, in *Japanese Patent* (1998).
- [11] T. Yanagitani, H. Yagi, and M. Ichikawa, in *Japanese Patent* (1998).
- [12] J. Liu et al., *Opt. Mater.* 37, 706 (2014).
- [13] F. Tang, Y. Cao, W. Guo, Y. Chen, J. Huang, Z. Deng, Z. Liu, and Z. Huang, *Opt. Mater.* 33, 1278 (2011).
- [14] C. Sallé, A. Maître, J.-F. Baumard, and Y. Rabinovitch, *Optical Review* 14, 169 (2007).
- [15] R. Boulesteix, A. Maître, J.-F. Baumard, Y. Rabinovitch, C. Sallé, S. Weber, and M. Kilo, *J. Eur. Ceram. Soc.* 29, 2517 (2009).
- [16] R. Boulesteix, A. Maître, J.-F. Baumard, C. Sallé, and Y. Rabinovitch, *Opt. Mater.* 31, 711 (2009).
- [17] H. Van Dijk, *Mater. Res. Bull.* 19, 1669 (1984).
- [18] A. Ikesue, K. Yoshida, T. Yamamoto, and I. Yamaga, *J. Am. Ceram. Soc.* 80, 1517 (1997).
- [19] S. Kochawattana, A. Stevenson, S.-H. Lee, M. Ramirez, V. Gopalan, J. Dumm, V. K. Castillo, G. J. Quarles, and G. L. Messing, *J. Eur. Ceram. Soc.* 28, 1527 (2008).
- [20] G. Philipps and J. Vater, *Appl. Opt.* 32, 3210 (1993).
- [21] S. H. Lee et al., *J. Am. Ceram. Soc.* 92, 1456 (2009).
- [22] K. Fujioka, A. Sugiyama, Y. Fujimoto, K. Kawanaka, and N. Miyana, in *9th Laser Ceramics Symposium*, Daejeon, Korea (2013).
- [23] M. Suárez, A. Fernández, J. Menéndez, M. Nygren, R. Torrecillas, and Z. Zhao, *J. Eur. Ceram. Soc.* 30, 1489 (2010).
- [24] A. J. Stevenson, E. R. Kupp, and G. L. Messing, *J. Mater. Res.* 26 (2011).
- [25] R. R. Tummala, *J. Am. Ceram. Soc.* 74, 895 (1991).
- [26] H. S. Jadhav, M.-S. Cho, R. S. Kalubarme, J.-S. Lee, K.-N. Jung, K.-H. Shin, and C.-J. Park, *J. Power Sources* 241, 502 (2013).
- [27] P. James and W. Shi, *J. Mater. Sci.* 28, 2260 (1993).
- [28] K. Tsukuma, *J. Ceram. Soc. Jpn.* 114, 802 (2006).
- [29] L. Moreira, L. Ponce, E. de Posada, T. Flores, Y. Peñaloza, O. Vázquez, and Y. Pérez, *Ceram. Int.* 41, 11786 (2015).
- [30] A. Ikesue and K. Kamata, *J. Am. Ceram. Soc.* 79, 1927 (1996).
- [31] M. I. Mendelson, *J. Am. Ceram. Soc.* 52, 443 (1969).
- [32] A. Ikesue, T. Kinoshita, K. Kamata, and K. Yoshida, *J. Am. Ceram. Soc.* 78, 1033 (1995).
- [33] O. Fabrichnaya, H. Jürgen Seifert, R. Weiland, T. Ludwig, F. Aldinger, and A. Navrotsky, *Z. Metallkd* 92, 1083 (2001).
- [34] A. Maître, C. Sallé, R. Boulesteix, J. F. Baumard, and Y. Rabinovitch, *J. Am. Ceram. Soc.* 91, 406 (2008).
- [35] M. Liu, S. Wang, D. Tang, L. Chen, and J. Ma, *Sci Sinter.* 40, 311 (2008).
- [36] J. Zhou et al., *Ceram. Int.* 37, 119 (2011).
- [37] Y. Shan, J. Xu, G. Wang, X. Sun, G. Liu, J. Xu, and J. Li, *Ceram. Int.* 41, 3992 (2015).
- [38] A. Belyakov and A. Sukhozhak, *Glass Ceram.* 52, 14 (1995).
- [39] G. Wilder, Chinese Light Industry Publisher, 20 (1980).
- [40] D. Taylor, D. Dent, D. Braski, and B. Fabes, *J. Mater. Res.* 11, 1870 (1996).
- [41] O. H. Kwon and G. L. Messing, *Acta Metall. Mater.* 39, 2059 (1991).

INTERMITTENT AND CONTINUOUS FLOWS IN GRANULAR PILES: EFFECTS OF CONTROLLING THE FEEDING HEIGHT

FLUJOS CONTINUOS E INTERMITENTES EN PILAS GRANULARES: EFECTOS DEL CONTROL DE LA ALTURA DE ALIMENTACIÓN

L. ALONSO-LLANES^a, L. DOMÍNGUEZ-RUBIO^a, E. MARTÍNEZ^a AND E. ALTSHULER^{a†}

Group of Complex Systems and Statistical Physics, Physics Faculty, University of Havana, 10400 Havana, Cuba; ealtshuler@fisica.uh.cu[†]

[†] corresponding author

Recibido 22/6/2017; Aceptado 12/9/2017

Using a specially designed experimental set up, we have studied the so-called continuous to intermittent flow transition in sand piles confined in a Hele-Shaw cell where the deposition height of the sand can be controlled in addition to the input flow. Through systematic measurements varying the height and the input flow, we have established how the size of the pile at which the transition takes place depends on the two parameters studied. The results obtained allows to explain, at least semi-quantitatively, the observations commonly reported in the literature, carried out in experiments where the deposition height is not controlled.

Utilizando un conjunto experimental especialmente diseñado, hemos estudiado la llamada transición de flujo continuo a intermitente en pilas de arena confinadas en una celda de Hele-Shaw donde la altura de deposición de la arena puede ser controlada además del flujo de alimentación. A través de mediciones sistemáticas que varían la altura y el flujo de entrada, hemos establecido cómo el tamaño de la pila al que tiene lugar la transición depende de los dos parámetros estudiados. Los resultados obtenidos permiten explicar, al menos semi-cuantitativamente, las observaciones comúnmente reportadas en la literatura, realizadas en experimentos donde la altura de deposición no fue controlada.

PACS: Hele-Shaw flows, 47.15.gp; Avalanches (granular systems), 45.70.Ht; Avalanches, phase transitions in, 64.60.av; Granular systems, classical mechanics of, 45.70.-n

I. INTRODUCTION

Granular media are relevant to many human endeavors: for example, they play a central role in the construction, food and pharmaceutical industries, and also as an important component of the natural environment [1–3]. During the last years, granular matter has been increasingly studied from the fundamental point of view by physicists. It has been used, for example, to establish analogies that allow to understand certain phenomena in other areas of physics and engineering, ranging from superconducting avalanches, due to the sudden motion of magnetic flux lines to urban traffic [4,5].

Granular piles –that we will generically call sandpiles– have been used as a model for segregation phenomena in geophysical scenarios, and also to illustrate the idea of self-organized criticality [1, 6–10]. Besides the well-known case of the sand down an inclined plane [11], a particularly attractive configuration of sandpiles is the Hele-Shaw cell: a pile of grains is grown confined between two vertical plates resting on an horizontal surface and separated by a distance w , where grains are poured from above, near a third vertical wall (see Figure 1) [9,12,13]. The height from which the grains are dropped to feed the pile has rarely been controlled in previous studies, and only by hand [12,13]. Only recently has an automatic system been designed to fully control the dropping height [14].

A well known feature of surface flows in granular piles is the existence of continuous flows (where the grains flows uniformly down the slope within a certain depth from the free surface of the pile) and intermittent flows (where an avalanche suddenly rolls down the surface of the pile, and accumulates at its lower edge, allowing a front to grow uphill until a new avalanche starts) [6,7,9]. The transition between the two regimes as the pile grows is, however, poorly understood.

In this paper, we have used the system described in reference [14] to study the transition from the continuous to the intermittent regimes of granular flows on the surface of a quasi-2D pile as a function of the height, h , from which the granular matter is fed into the system (see Figure 1). We put

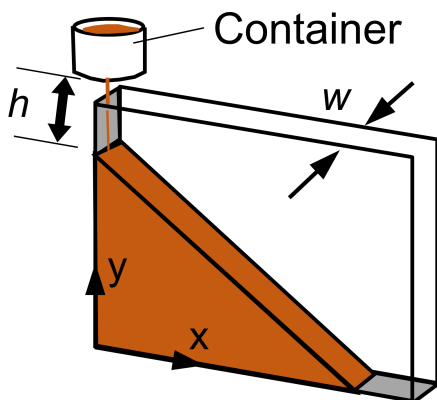


Figure 1. Sketch of the Hele-Shaw cell where the main parameters and coordinates are indicated.

special emphasis in unveiling the relation that exists between “conventional” experiments –i.e., those where the dropping height is not controlled– and those where it is kept constant in time.

II. RESULTS AND DISCUSSION

In every experiment, the behavior of the deposition height, h , and the area of the pile were measured as a function of time (the latter allows to compute the input flow, and make sure it is constant along the whole experiment). For the determination of the spatial-temporal coordinates of the transition, the evolution in time of a horizontal line of pixels located at a height equal to half the width of the input flow, from the bottom of the Hele-Shaw cell, was analyzed (Figure 2). The choice of vertical position of the line was taken based on the fact that it was important to leave out the “tail” at the base of the pile, which departs from the linear profile. On the other hand, since that “tail” increases in size with the input flow, it was reasonable to relate the position of the line with a characteristic length of it. In some cases where the end of the continuous regime (or the beginning of the intermittent one) is not so evident, it is necessary to use the curve of the angle of the pile versus time (which is also obtained from the image processing) as a complementary measurement to obtain the coordinates of the transition: the intermittent regime is then picked up where the angle of the pile starts a quasi-periodic oscillatory behavior.

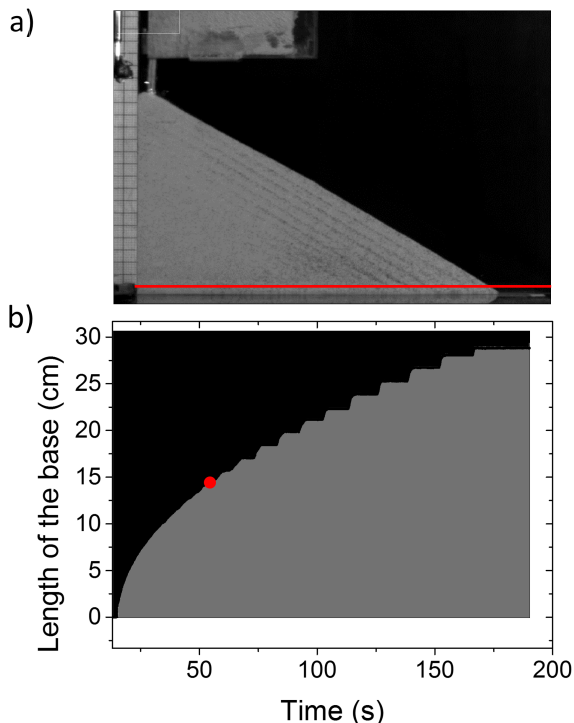


Figure 2. a) Snapshot taken from a video of a typical experiment. The horizontal red line is used to construct the spatial-temporal diagram. b) Spatial-temporal diagram based on the horizontal red line of a). The red dot indicates the coordinate of the continuous to intermittent flow transition.

Two types of experiments were performed. In the first group, we kept the feeding height constant in time, as well as the input flow. In the second, the input flow was

kept constant, but the feeding height decreased as the pile height increased, since the pile grew up while the dropping altitude was kept fixed at a height equal to 23 cm. In all experiments, the horizontal size of the pile where the transition from continuous to intermittent flow occurred, X_c , was determined, as shown in Figure 3 (illustrating with the case where the feeding height is kept constant). Notice that the continuous lines shown in Fig. 3 are just the best mathematical fits, waiting for a proper physical interpretation in the future.

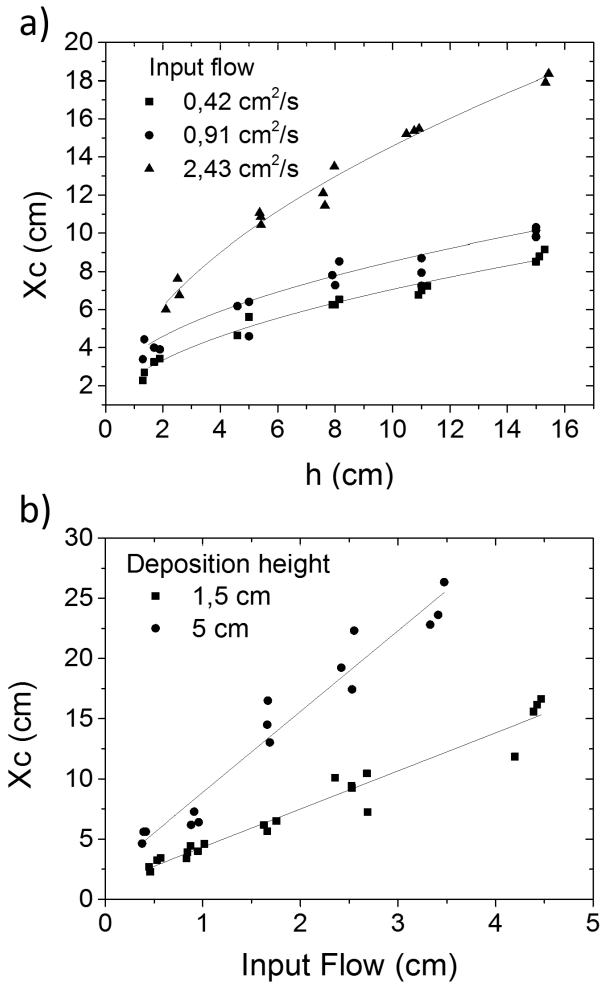


Figure 3. Dependence of the transition spatial coordinate X_c as a function of a) the deposition height for different input flows and b) the input flow F for different deposition heights. The continuous lines follow the law a) $X_c \propto h^{0.5}$ with values of R-squared of 0.98, 0.92 and 0.97 respectively and b) $X_c \propto F$ with values of R-squared of 0.95 for each one. The data was taken from experiments where h was kept constant. We repeated at least three times the experiments for each pair of values of deposition height and input flow. Differences of the values of the parameters, deposition height and input flow, are due to the nature of the initial conditions in each experiment, which were tuned manually.

Using the obtained temporal coordinates of the transition, it is possible to establish a link between controlled h and non-controlled h experiments. We do that by constructing a “phase diagram” based on the experimental data of the time at which transition occurs. The resulting “phase diagram”, illustrated in Fig. 4 for two values of the input flow, allows to predict the time at which the continuous to intermittent transition occurs for piles without controlling deposition

height, based on the data obtained from piles with controlled deposition height, as we will explain below in detail. Moreover our diagrams allows to find, for any experiment with fixed deposition height, h , an equivalent experiment with non-controlled h where continuous to intermittent transition take place at the same time, being equal the input flows.

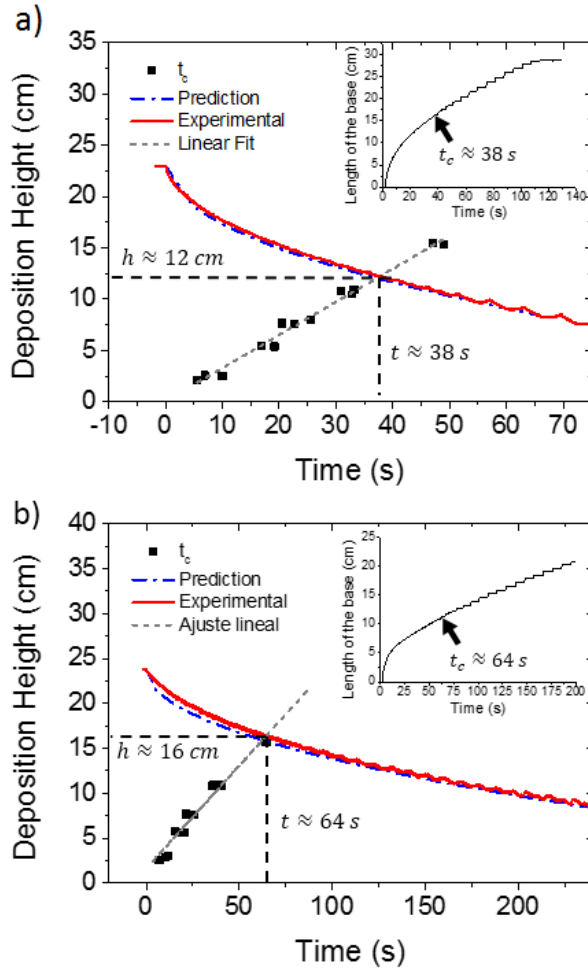


Figure 4. Connection between fixed and variable h experiments. Dots represent the temporal coordinates of the transition measured in our experiments for different values of h , where it is kept constant for each experiment. The solid lines are the variation of the deposition height measured for non-controlled experiments –i.e., where h decreases in time as the pile grows. The lines with dashes and dots are predictions (see text). Inset: Evolution of the horizontal size of the pile obtained from the spatial-temporal diagram for the non-controlled experiment (red line). The experiments illustrated have an input flux of a) $2.43 \text{ cm}^2/\text{s}$ and b) $0.75 \text{ cm}^2/\text{s}$.

Figure 4 shows, for one input flow, the temporal coordinates t_c of the transition for experiments with different fixed deposition heights, as well as the dependence of the deposition height with time for an experiment where it was non-controlled. The black dots follow a linear dependence with h that delimitates, from left to right, the end of the continuous phase and the beginning of the intermittent one. Prediction curves were made applying the mass conservation principle. It was obtained that the deposition height for a non-controlled experiment varies as $h_0 - \sqrt{2tF \tan \theta_c}$, where h_0 is the initial height of the container over the bottom of the Hele-Shaw cell, F the input flow in cm^2/s and θ_c the critical

angle of the pile's surface.

III. CONCLUSIONS

In summary, we have performed the first systematic study of the transition from the continuous to the intermittent regimes of granular flows on a sand heap, including both conventional experiments, as well as those where the deposition height is controlled to be constant in time. We have demonstrated the relation between the two situations, in such a way that we are able to predict at what time the transition will take place for a non-controlled deposition height, based on the data taken from experiments with controlled deposition heights. This constitutes a first and necessary step to fully understand the physical nature of the transition.

REFERENCES

- [1] B. Andreotti, Y. Forterre and O. Pouliquen, Granular media: between fluid and solid, (Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom, 2013) pp 1-3.
- [2] J. Teichman, Confined Granular flow in Silos: Experimental and Numerical Investigations, (Springer International Publishing Switzerland, Switzerland, 2013) pp 1-3.
- [3] S. J. Antony, W. Hoyle and Y. Ding (Editors), Granular Materials: fundamentals and applications, (The Royal Society of Chemistry, Cambridge, United Kingdom, 2004).
- [4] E. Altshuler and T. H. Johansen, Rev. Mod. Phys. 76, 471 (2004).
- [5] E. Altshuler, O. Ramos, C. Martínez, L. E. Flores, and C. Noda, Phys. Rev. Lett. 86, 5490 (2001).
- [6] I. Aranson and L. S. Tsimring, Rev. Mod. Phys. 78, 641 (2006).
- [7] E. Altshuler, O. Ramos, E. Martínez, A. J. Batista-Leyva, A. Rivera, and K. E. Bassler, Phys. Rev. Lett. 91, 014501 (2003).
- [8] E. Martínez, C. Pérez-Penichet, O. Sotolongo-Costa, O. Ramos, K. J. Måløy, S. Douady, and E. Altshuler, Phys. Rev. E 75, 031303 (2007).
- [9] E. Altshuler, R. Toussaint, E. Martínez, O. Sotolongo-Costa, J. Schmittbuhl, and K. J. Måløy, Phys. Rev. E 77, 031305 (2008).
- [10] O. Ramos, E. Altshuler and K. J. Måløy, Phys. Rev. Lett. 102, 078701 (2009).
- [11] S. Parez, E. Aharonov, and R. Toussaint, Phys. Rev. E, 93, 042902 (2016).
- [12] Y. Grasselli, H. J. Herrmann, G. Oron and S. Zapperi, Granular Matter 2, 97 (2000).
- [13] Y. Grasselli and H. Herrmann, Physica A 246, 301 (1997).
- [14] L. Domínguez-Rubio, E. Martínez and E. Altshuler, Rev. Cub. Fís. 32, 111 (2015).

EFFECT OF THE ELECTROMAGNETIC FIELD ON THE PHOTOISOMERIZATION OF THE RHODOPSIN MOLECULE

EFFECTO DEL CAMPO ELECTROMAGNÉTICO SOBRE LA FOTOISOMERIZACIÓN DE LA MOLÉCULA RODOPSINA

J. CERUTTI-TORRES^{a†}, F. RODRÍGUEZ-HERNÁNDEZ^a, A. MARTÍNEZ-MESA^a, L. URANGA-PIÑA^a

DynAMoS (Dynamical processes in Atomic and Molecular Systems), Facultad de Física, Universidad de La Habana, San Lázaro y L, La Habana 10400, Cuba; jcerutti@fisica.uh.cu[†]

[†] corresponding author

Recibido 22/3/2017; Aceptado 23/10/2017

Molecular photoisomerization is a process of configurational rearrangement induced by the action of electromagnetic radiation and whose efficiency can be controlled via the manipulation of the electric field that triggers the reaction. In the present work, we introduce a theoretical model for the isomerization process that incorporates the essential features of this phenomenon at the microscopic level. Two potential energy surfaces and two degrees of freedom are used to represent the active center of the molecule. The effect of the electric field on the overall dynamics is studied by considering different widths and shapes of the exciting field, within the electric dipole approximation. The rest of the system is modelled as a set of classical harmonic oscillators. The model reproduces previously reported experimental results on the isomerization yield upon instantaneous excitation and it predicts the behavior of the system under the action of laser pulses of finite duration.

La fotoisomerización molecular es un proceso de reordenamiento configuracional inducido por la acción de radiación electromagnética y cuya eficiencia puede controlarse mediante la manipulación del campo eléctrico que desencadena la reacción. En el presente trabajo se introduce un modelo teórico del proceso de isomerización que incorpora las características esenciales del fenómeno a nivel microscópico. Se utilizan dos estados electrónicos y dos modos nucleares para representar el centro activo de la molécula. El efecto del campo eléctrico sobre la dinámica se estudia a partir de la consideración de pulsos de diferentes formas y anchos temporales, dentro de la aproximación dipolar eléctrica. El resto de la molécula se modela como un conjunto de osciladores armónicos clásicos. El modelo reproduce resultados experimentales reportados previamente para la probabilidad de isomerización de la molécula rodopsina ante una excitación instantánea y predice el comportamiento del sistema bajo la acción de pulsos láser de duración finita.

PACS: Semiclassical theories in atomic physics (31.15.xg); Isomerization reactions (82.30.Qt); Ultrafast processes in femtochemistry (82.53.-k); Perturbation theory (31.15.xp); Molecular dynamics (31.15.xv)

I. INTRODUCTION

In the last decades, *cis* to *trans* isomerization has been the subject of a large number of experimental and theoretical works due to its importance in many chemical and biological processes [1–3]. Isomerization is a physical-chemical process in which the atoms forming a molecule change their equilibrium positions. *Cis* and *trans* configurations of the molecule usually exhibit notable differences in their physical and chemical properties. The energy required to activate the process is often provided by external perturbations. Typically, optical pulses are employed to excite the chromophore in the molecular system and to trigger the isomerization. In this case, the process is called photoisomerization.

The mechanism of human beings vision, the breaking of DNA strings and the activation of green fluorescent proteins are some examples of natural phenomena that involve photoisomerization [4–7]. Possible technological applications include nanometric motors and vehicles, molecular switches and memories [8–10]. The optimization of the wide family of possible applications demands the development and implementation of accurate microscopic

descriptions of isomerization, and the possibility to control the outcome of the process by manipulating external parameters such as the width, shape and intensity of the optical pulses [11,12].

Different schemes based on the Classical Molecular Dynamics method are routinely used in a variety of dynamical problems with accurate results. Yet, molecular isomerization is an intrinsically quantum mechanical phenomenon that can not be adequately described using the laws of classical mechanics, as it exhibits pronounced non-adiabatic effects. A realistic description of the dynamics of these processes implies the simultaneous evolution of the system on different potential energy surfaces (PES). Nonetheless, a rigorous quantum-mechanic description of large polyatomic systems is infeasible at present due to its high computational cost.

Usually, a small part of the system (the active centre) reacts to the external perturbation, while the rest of the degrees of freedom behaves like a thermal bath (i.e., it takes part only in the redistribution of the excess energy deposited by the laser). The second group may be described using a less accurate methodology, for instance employing a classical or semiclassical approximation. This separation motivates the

development of hybrid quantum-classical models like the one introduced in this paper.

The present work focuses in the description of the interaction between a rhodopsin molecule and optical pulses of finite width using a hybrid quantum-classical approach for the description of the non-adiabatic dynamics. In the next section, the model Hamiltonian is presented as well as the methodology followed to compute the isomerization yields and the electronic and isomeric populations. Then, the results of the simulation of the isomerization dynamics are presented and discussed. Finally, some conclusions are drawn.

II. THEORETICAL MODEL

II.1. Unperturbed Hamiltonian

The main aspects of the dynamical response of the active centre of rhodopsin can be captured by a model Hamiltonian comprising two dimensionless coordinates: the torsion angle φ , that describes the twist around the C₁₁-C₁₂ double bond [13], and q , which characterizes the collective vibrational motion of the active centre. The *cis* and *trans* configurations correspond to the ranges $-\frac{\pi}{2} < \varphi < \frac{\pi}{2}$ and $\frac{\pi}{2} < \varphi < \frac{3\pi}{2}$ of the isomerization coordinate, respectively.

Only two diabatic electronic states are involved in the process, the ground state $|0\rangle$ and the first excited state $|1\rangle$. The isomerization process takes place when the molecule is promoted to the excited state, it evolves on the excited PES, and eventually it passes through a conical intersection, where the wave function of the system splits in two separate wave packets each one approaching the *cis* or the *trans* configuration. The Hamiltonian for this two-state two-dimensional problem, in atomic units and in the diabatic representation, is written as [14]

$$\hat{H}_0 = \sum_{n,m=0,1} |n\rangle (\hat{T}\delta_{nm} + \hat{V}_{nm}) \langle m|, \quad (1)$$

where

$$\hat{T} = -\frac{1}{2I} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{\omega}{2} \frac{\partial^2}{\partial q^2}, \quad (2)$$

is the kinetic energy operator, I is the moment of inertia of the active centre, corresponding to the motion along the isomerization coordinate, and ω is the frequency of the collective mode q .

$$\begin{aligned} \hat{V}_{nn} &= E_n + (-1)^n \frac{1}{2} \tilde{V}_n (1 - \cos \varphi) + \frac{\omega}{2} q^2 + \kappa q \delta_{n1}, \\ \hat{V}_{01} &= \hat{V}_{10} = \lambda q, \end{aligned} \quad (3)$$

are the potential energy surfaces and couplings in the diabatic representation. The numerical values of the parameters in equations (1)-(3) are chosen as in Ref. [15]: $I^{-1} = 4.84 \cdot 10^{-4}$ eV, $E_0 = 0$ eV, $E_1 = 2.48$ eV, $\tilde{V}_0 = 3.6$ eV, $\tilde{V}_1 = 1.09$ eV, $\omega = 0.19$ eV, $\kappa = 0.1$ eV y $\lambda = 0.19$ eV. This set of parameters reproduces the vertical excitation energies measured for a rhodopsin molecule in the *cis* and *trans* configurations. The physical

interpretation of the quantities κ and λ follows from equation (3): the former represents the gradient along the q coordinate on the excited state, whereas the latter characterizes the strength of the non-adiabatic coupling between the electronic states.

II.2. Interaction with the electromagnetic field

If we consider a finite optical pulse excitation, there will be an additional coupling between the electronic states (besides the non-adiabatic terms in the Hamiltonian (1)) due to the field-matter interaction, influencing the exchange of population between these states. To take into account the effect of the finite electromagnetic pulses, it is necessary to add the field-molecule interaction to the unperturbed Hamiltonian. Within the dipole approximation

$$\hat{W}(t) = -E(t) \begin{pmatrix} 0 & \mu_{01} \\ \mu_{10} & 0 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

The functions $\mu_{01} = \mu_{10} = \langle 0|\hat{\mu}|1\rangle$ denote the matrix elements of the transition dipole moment, which is chosen to be constant within the Franck-Condon approximation. The component of the external electric field along the molecular axis is written as

$$E(t) = E_0 f(t, \sigma) \cos(\omega t), \quad (5)$$

where the function $f(t, \sigma)$ is the envelope of the laser pulse of width σ . The frequency ω is chosen to be constant and its value is set to satisfy the resonance condition for the diabatic PES at the Franck-Condon point.

For simplicity, Gaussian profiles are the standard choice for the form of the pulse envelope in theoretical investigations of ultrafast photoinduced phenomena. Nevertheless, Gaussian functions can not accurately describe many realistic pulses which exhibit slowly falling wings. For that reason, in this work non-Gaussian forms for $f(t, \sigma)$ are also taken into account, e.g., *sech*² and Lorentzian functions [12]. In each case, the parameter σ stands for the full width at half maximum of the laser pulse. The numerical values $\sigma = 1, 5, 20, 50, 100, 200$ fs were considered for this parameter. They are representative of the range of interest in femtosecond spectroscopy applications.

In the majority of practical applications, the fields used have a relative small intensity to avoid the undesired occurrence of the so-called Rabi oscillations. This is why the field-molecule interaction $\hat{W}(t)$ described by Eq. (4) can be treated within the first-order perturbation theory.

II.3. Thermal bath

The Hamiltonian for the thermal bath is taken as

$$H_B = \sum_{\alpha} \frac{\omega_{\alpha}}{2} (x_{\alpha}^2 + p_{\alpha}^2). \quad (6)$$

The quantities x_{α} and p_{α} are the canonical coordinates and momenta for each degree of freedom included in the

bath. They describe the motion of the atoms surrounding the active centre (the rest of the rhodopsin molecule). The magnitudes ω_α stand for the vibrational frequencies of these modes. Their values were chosen to reproduce the results of Raman spectroscopy measurements carried out on rhodopsin molecules [13].

II.4. System-bath dynamics

A detailed account of the methodology used to update the dynamical state of the system can be found elsewhere [14]. It involves the simultaneous solution of the time-dependent Schrödinger equation along the degrees of freedom of the active centre, and the Hamilton's equations of motion for the classical modes. The coupling between the quantum and the classical subsystems is described by the interaction Hamiltonian described in Ref. [3], which may be rewritten as

$$\hat{H}_{int} = \sum_{n=0,1} |n\rangle \sum_{\alpha} \left[g_{\varphi}^{(\alpha)} \cos^2\left(\frac{\varphi + n\pi}{2}\right) + \frac{g_q^{(\alpha)}}{2} q \right] \chi_{\alpha} \langle n|. \quad (7)$$

The coupling constants $g_{\varphi}^{(\alpha)}$ and $g_q^{(\alpha)}$ are chosen according to the Ohmic spectral bath densities

$$\frac{\pi}{2} \sum_{\alpha} g_s^{(\alpha)} \delta(\omega - \omega_{\alpha}) = \eta_s \omega e^{-\omega/\omega_{sc}} \quad s = \{\varphi, q\}, \quad (8)$$

with the dimensionless coupling strengths $\eta_{\varphi} = 0.15$, $\eta_q = 0.10$, and the cut-off frequencies $\omega_{\varphi c} = 0.08$ eV, $\omega_{qc} = 0.20$ eV, respectively.

Electronic populations are computed by projecting the time-dependent wave function on the diabatic basis, while the isomeric populations are obtained by integrating the probability density over the ranges of the torsion angle φ corresponding to the *cis* and *trans* conformations.

III. RESULTS AND DISCUSSIONS

III.1. Instantaneous pulse

Figure 1 shows the time evolution of the two configurational states computed assuming an instantaneous excitation. At the beginning of the simulation ($t = 0$), the system is entirely in the *cis* configuration ($P_{cis}|_{t=0} = 1$), which reflects the initial condition imposed to the molecular wave packet. Since the laser pulse is assumed to be infinitely narrow, the promoted wave packet is an exact copy of ground state wave function, which is centred at the *cis* configuration. The populations change very rapidly, and around $t = 110$ fs the population of the excited state has decreased to 0.5. After some strong oscillations corresponding to the population transfer near the conical intersection, the values of the *cis-trans* populations get stabilized. At $t = 1$ ps the populations have reached their equilibrium values of $P_{cis}|_{t \rightarrow \infty} = 0.44$ and $P_{trans}|_{t \rightarrow \infty} = 0.56$. It can be noticed, that the probability for the molecule to return to its initial (*cis*) configuration is less than 50 %.

Figure 2 shows the time evolution of the diabatic electronic populations. The time origin is set to coincide with the instantaneous promotion of the wave packet to the excited state. Therefore, the initial population of the excited state is $P_1|_{t=0} = 1$. Conversely to the behaviour of the configurational states, the populations of the diabatic states change more slowly.

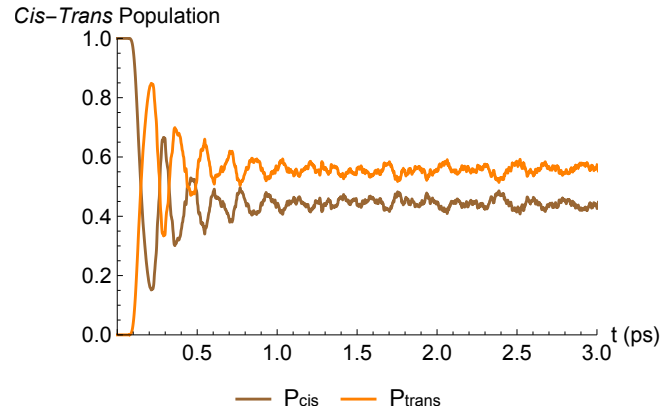


Figure 1. *Cis-trans* isomeric populations. At $t = 0$, the system is prepared in the *cis* configuration. The populations change very fast and after 1 ps they have reached their equilibrium values of $P_{cis}|_{t \rightarrow \infty} = 0.44$ and $P_{trans}|_{t \rightarrow \infty} = 0.56$.

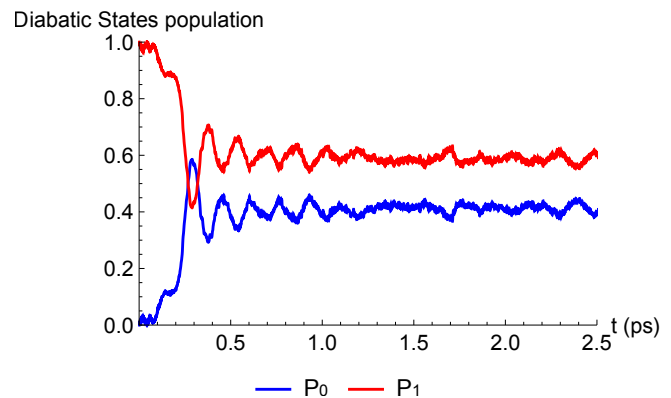


Figure 2. Diabatic electronic populations. In the beginning, the molecule is placed in the excited state. The populations change due to the coupling between the states near the conical intersection. The populations stabilize at $t = 0.5$ ps, reaching the values $P_1|_{t \rightarrow \infty} = 0.6$ and $P_2|_{t \rightarrow \infty} = 0.4$.

This is due to the fact that when the molecular wave packet reaches the *trans* configuration for the first time, it crosses the location of the conical intersection while it still remains on the excited diabatic PES. This process is dominated by the energetic difference between the hill and the valley on the excited diabatic state. The major part of the population transfer from the excited to the basic diabatic state takes place when the wave packet reaches the conical intersection for the second time, in this case with much less kinetic energy. The energy loss is dominated by the coupling terms between the active centre and the thermal bath. The populations stabilize after 0.5 ps to the asymptotic values $P_1|_{t \rightarrow \infty} = 0.6$ and $P_2|_{t \rightarrow \infty} = 0.4$.

The isomeric populations in each adiabatic state was also analysed and it was compared with previously reported

results for $\delta(t)$ -like excitations. The time scale of the process (~ 200 fs) is found to be in good agreement with experimental reports [15].

III.2. Effect of the shape of the envelope function and of the pulse width

Figure (3) shows the asymptotic values of the *trans* population for the three forms of the envelope function considered and for different widths of the laser pulse. It can be seen that, as a general trend, the three pulse shapes produce similar asymptotic values and they show a similar behaviour as a function of the pulse width. For the finite pulses, the *trans* population at long times increases as the value of σ gets larger. For every width, the lowest value of the isomerization probability corresponds to the Gaussian field. The asymptotic values of the *trans* population, computed for the Lorentzian and the sech^2 laser pulse shapes are similar to each other compared with the results of the calculations employing a Gaussian field.

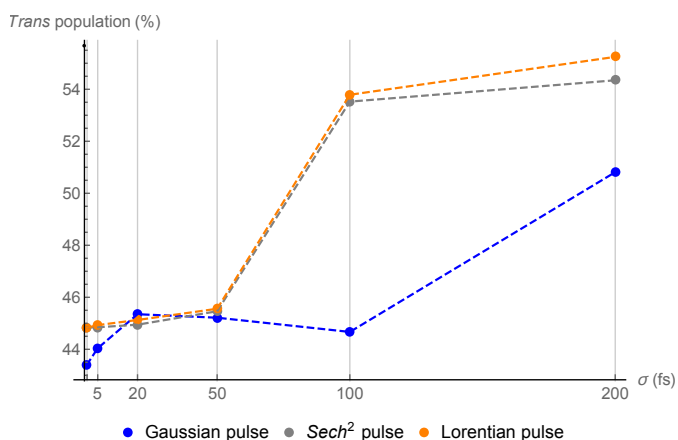


Figure 3. Asymptotic values of *trans* populations as a function of σ for the three envelopes shapes considered in this work. For the finite pulse widths, the *trans* populations increases with the value of σ .

IV. CONCLUSIONS

We studied the effect of a finite-width optical pulse in the photoisomerization of a rhodopsin molecule, in the weak-field regime and using first order perturbation theory. The *cis* to *trans* photoisomerization was investigated employing a hybrid quantum-classical model which describes quantum-mechanically the active centre of the

molecule, while the rest of the system is treated as a bath of classical harmonic oscillators. The parameters of the model Hamiltonian were chosen to reproduce experimental data from Raman spectroscopy measurements performed on rhodopsin molecules. The time scale of the isomerization process obtained in the numerical simulations is in good agreement with previous experimental results reported in the literature.

We analysed the influence of the duration and the shape of the exciting pulse on the isomerization yield and on the electronic population dynamics. The results of the simulations point to the possibility to mildly control the non-adiabatic dynamics of the target molecule by tailoring the external electromagnetic field.

REFERENCES

- [1] B. G. Levine, T. J. Martínez, *Annu. Rev. Phys. Chem.*, 58, 613 (2007).
- [2] M. Garavelli, P. Celani, F. Bernardi, M.A. Robb, M. Olivucci, *J. Am. Chem. Soc.*, 119, 6891 (1997).
- [3] W. Domcke, D. R. Yarkony, H. Köppel (Eds.), *Conical Intersections: Electronic Structure, Dynamics and Spectroscopy*. (World Scientific, Singapore 2004).
- [4] D. Polli *et al.*, *Nature* 467, 440 (2010).
- [5] G. Wald, *Science*. 162, 230 (1968).
- [6] B. Juskowiak, A. Dominiaka, S. Takenakab, M. Takagib, *Photochem. Photobiol.* 74, 391 (2001).
- [7] W. Weber, V. Helms, J.A. McCammon, P.W. Langhoff, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. 96, 6177 (1999).
- [8] T. Raecker, N. O. Cartensen, B. Hartke, *J. Phys. Chem. A*. 116, 11241 (2012).
- [9] W. R. Browne, B. L. Feringa, *Nat. Nanotechnol.* 1, 25 (2006).
- [10] A.A. Beharry, G.A. Woolley, *Chem. Soc. Rev.* 40, 4422 (2011).
- [11] A. H. Zewail, *Adv. Chem. Phys.* 101, 892 (1997).
- [12] A. Martínez-Mesa, P. Saalfrank, *J. Chem. Phys.* 142, 194107 (2015).
- [13] S. W. Lin, M. Groesbeek, I. van der Hoef, P. Verdegem, J. Lugtenburg, R. A. Mathies, *J. Phys. Chem. B*. 102, 2787 (1998).
- [14] F. Rodríguez-Hernández, A. Martínez-Mesa, L.I. Uranga-Piña, *Chem. Phys. Lett.* 592, 18 (2014).
- [15] X. Chen, V. S. Batista, *J. Photochem. Photobiol.*, A. 190, 274 (2007).

DISEÑO DE PORTA-MUESTRA ROTATORIO PARA LA OPTIMIZACIÓN DEL PROCESO DE SEDIMENTACIÓN DE NANOESTRUCTURAS

ROTARY SAMPLE HOLDER DESIGN FOR THE OPTIMIZATION OF THE NANOSTRUCTURES SEEDING

O. CRUZATA^a, I. CONCINA^b, L. VAILLANT^{c†}

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

b) Division of Materials Science, Department of Engineering Science and Mathematics, Luleå University of Technology, Luleå SE-971 87, Sweden.

c) División ENERMAT, Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE) y Facultad de Física, Universidad de la Habana, La Habana, Cuba; vaillant@imre.uh.cu[†]

† autor para la correspondencia

Recibido 7/4/2017; Aceptado 26/10/2017

Se diseñó y construyó un dispositivo consistente en un conjunto camisa - émbolo mediante el que se logró la sujeción posterior de una muestra que se somete a cerca de 2000 rpm de forma estable. De este modo, se logra reproducir el principio de funcionamiento del sistema de crecimiento por *spin-coating* comercial. El dispositivo fue utilizado exitosamente en la activación por centros de nucleación de ZnO sobre vidrio para la obtención por una técnica hidrotermal de nanovarillas de ZnO aplicables en celdas solares nanoestructuradas.

A cylinder-plug device capable of holding a sample and rotating at 2000 turns per second in a stable fashion was designed and constructed. It reproduces the working principle of a commercial *spin-coating* system to grow films. The device was successfully used in the activation by nucleation centers of ZnO on glass for the hydrothermal obtainment of ZnO nanorods, of potential use in nanostructured solar cells.

PACS: Sample preparation (including design of sample holders) 06.60.Ei; Design of experiments 07.05.Fb; Nanocrystalline materials 81.07.Bc; Chemical synthesis methods 81.16.Be; Structure of nanowires and nanorods 61.46.Km

I. INTRODUCTION

Los materiales nanoestructurados han sido uno de los focos fundamentales de la investigación moderna. Entre las aplicaciones más interesantes se encuentran las celdas solares nanoestructuradas, que en la comunidad fotovoltaica se denominan también celdas solares de tercera generación.

Uno de los materiales más utilizados en la construcción de dicho tipo de celdas es el óxido de zinc (ZnO). La obtención del ZnO nanoestructurado suele comenzar con la preparación del sustrato mediante la deposición, por ejemplo, por *spin-coating*, de nanopartículas que actúan como puntos de nucleación (Fig. 1) [1]. Dicho paso tecnológico se denomina activación o sedimentación.

El proceso de activación o sedimentación determina que la superficie del sustrato sea cubierta en modo homogéneo por las nanoestructuras. Sin este paso, el crecimiento ocurre en forma dispersa y sin control de la morfología [2,3].

No obstante, en los laboratorios no siempre se cuenta con sistemas comerciales de *spin-coating*. En ese caso, se puede utilizar un simple sistema de rotación, pero se enfrenta el problema experimental de sujetar la muestra por su base dejando completamente libre su superficie para el deslizamiento de la solución mientras se somete la misma a una rotación de varios miles de revoluciones por minuto. Con el objetivo de solucionar el problema enunciado, se diseñó un dispositivo sencillo y posible de fabricar en los talleres de elaboración mecánica asociados a los centros de investigación y laboratorios.

Se presentan aquí los detalles del diseño de este dispositivo, así como las imágenes de microscopía electrónica de barrido de las muestras de semillas y de nanovarillas de ZnO obtenidas posteriormente.

II. DESCRIPCIÓN EXPERIMENTAL

Fabricación del dispositivo: Las partes del porta muestra se confeccionaron de polipropileno y fueron elaboradas mediante desbaste por arranque de virutas en las siguientes máquinas herramientas universales: torno 16B05P precisión

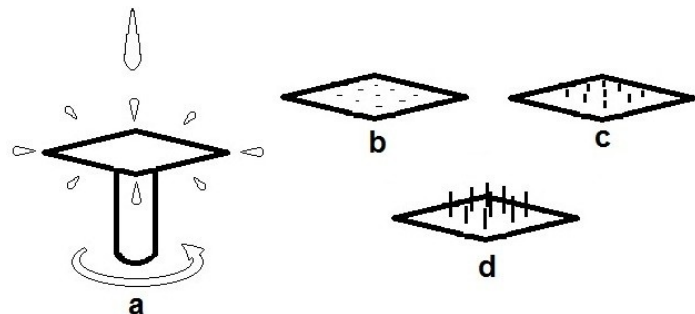


Figura 1. Diagrama del proceso de sedimentación. a) esquema de *spin-coating*, b) semillas, c) inicio del crecimiento de las nanovarillas, d) nanovarillas.

0.02 mm y fresadora 6T80III precisión 0.05 mm.

Obtención de semillas y nanovarillas: Se utilizaron como sustratos vidrios del tipo soda lime previamente sometidos a limpieza química. Para la obtención de las semillas se siguió el procedimiento de [3]. En el proceso por *spin-coating* el sustrato cubierto con la solución se hizo girar a 2000 rpm durante 20 segundos. El proceso se repitió dos veces, después de lo cual los sustratos fueron llevados a un horno cerrado a una temperatura de 350°C durante 20 minutos. Finalmente, las nanovarillas se crecieron siguiendo [4].

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 FEI modelo Leo 1525.

III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La técnica de crecimiento por *spin-coating* ha sido extensamente utilizada para obtención de películas delgadas de bajo costo [5-7]. Para nuestro diseño hemos previsto que el porta sustrato se mantenga en posición horizontal y estable durante los ciclos de rotación. Además, no deben existir bordes que impidan el escurrido de la sustancia sobrante y se busca minimizar el área afectada al sostener o manipular el porta sustrato.

Tomando en consideración que los sustratos utilizados en el laboratorio para la generación de las semillas son notablemente ligeros, que todo el procedimiento se realiza en posición horizontal y que a consecuencia de ello, los valores de la presión de vacío necesaria para la garantizar la sujeción son bajos, se diseñó un conjunto camisa - émbolo (Fig. 2) con la fuerza de succión suficiente para mantener los sustratos asegurados y estabilizados durante la rotación.

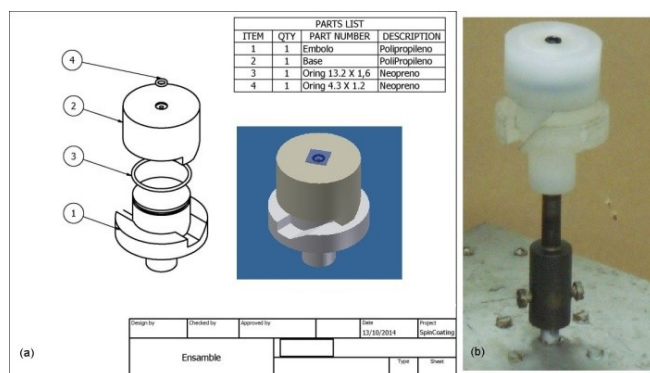


Figura 2. Conjunto camisa - émbolo. Plano (a) y foto (b).

La camisa se concibió en forma de cilindro hueco cuya superficie interna ha sido pulida para facilitar el deslizamiento del émbolo sin perder la estanquidad (Fig. 2(a)). La pieza sirve de base al sustrato mediante un *o-ring* de 4.3x1.2 mm y tiene dos salientes diametralmente opuestos elaborados con una inclinación para permitir que el desplazamiento vertical entre la camisa y el émbolo sea suave y fácil de controlar.

El émbolo es básicamente un cilindro escalonado provisto de un *o-ring* de 13.2x1.6 mm que garantiza la hermeticidad con la camisa, soporta todo el dispositivo y es insertado firmemente en el eje del motor de la centrífuga (Fig. 2(a)). En el mismo se han elaborado dos ranuras inclinadas que funcionan como par deslizante en correspondencia con los salientes de la camisa.

El dispositivo se ensambla fijando el émbolo al eje del motor (Figs. 2(a) y (b)). A continuación se coloca la camisa en el émbolo y se desliza hasta la posición inferior. Posteriormente se coloca el porta sustrato sobre el *o-ring* superior y girando la camisa en sentido antihorario se logra el desplazamiento vertical ascendente con respecto al émbolo, creándose la presión de vacío necesaria para fijar el porta sustrato en su posición y realizar el centrifugado.

El dispositivo es fácil de esterilizar, está compuesto por pocas piezas y requiere una sencilla manipulación, cuidando que las muestras no se encuentren innecesariamente expuestas al contacto con otras partes del propio dispositivo o con las manos de la persona que realiza el procedimiento. Con este porta-muestra ha sido posible manipular sustratos de hasta 2.5 cm² de área y 3 mm de espesor.

En la Fig. 3 se observa una imagen de microscopía electrónica de barrido de una muestra típica de las nanovarillas de ZnO obtenidas, en cuya parte superior derecha se ha insertado un corte transversal de la misma.

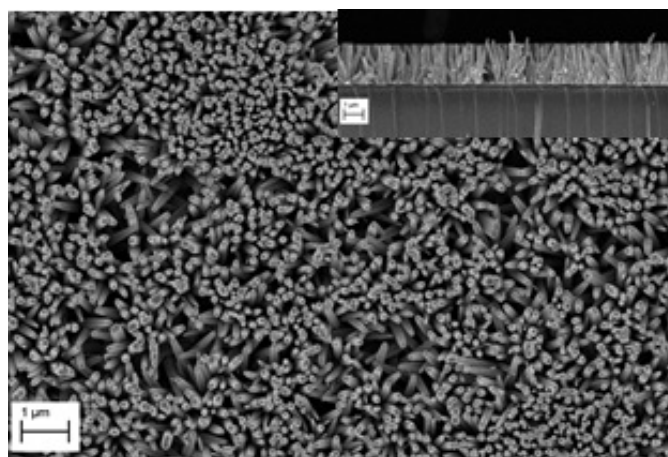


Figura 3. Imagen de microscopía electrónica de barrido de las nano varillas de ZnO obtenidas por CBD. Se inserta sección transversal.

Como se puede observar las nanovarillas cubren la superficie del sustrato de manera homogénea, tal y como se esperaba después del proceso de sedimentación. Las nanovarillas obtenidas muestran una geometría hexagonal con un diámetro de aproximadamente 100 nm.

En la Fig. 4 se puede distinguir una visión de conjunto de las semillas y las nano varillas al observar las partes obtenidas de un raspado de las muestras.

En las Figs. 4(a)-(c) se puede apreciar la capa de semillas, que muestra una excelente homogeneidad. Las acumulaciones presentes son debidas al proceso de raspado. En las Figs. 4(d)-(f) puede verse con un cierto ángulo de inclinación la secuencia de magnificación de un racimo de nanovarillas.

Destacamos la presencia de la capa de semillas pues es este paso experimental el que hace posible la homogeneidad de la muestra y la mejor alineación vertical de las nano varillas (ver imagenes insertadas en las Figs. 3 y 4(b)). El dispositivo propuesto en este artículo tiene un vínculo directo con que la fabricación de la capa de semillas sea un paso tecnológico reproducible.

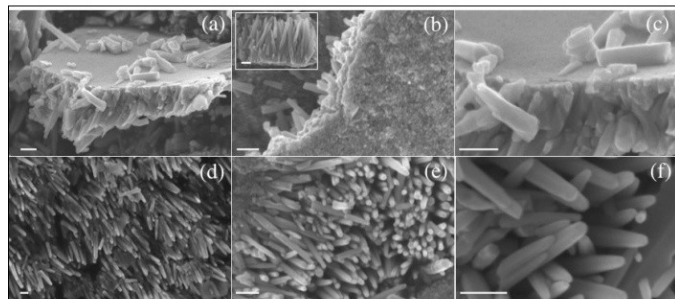


Figura 4. (a)-(c) Imágenes de SEM de las capas de semillas depositadas mediante el *spin-coating* libre de vacío. Se inserta en (b) detalles de un racimo de nanorods crecidos verticalmente sobre la capa de semillas. (d)-(f) Imágenes de SEM de nanovarillas de ZnO con incremento de la magnificación. Barra de escala: 200 nm).

IV. CONCLUSIONES

Se diseñó y construyó un dispositivo de polipropileno en base a un conjunto camisa - émbolo mediante el que se logró la sujeción posterior de una muestra que se somete a cerca de 2000 rpm durante 20 segundos en modo estable. De este modo, se logra reproducir el principio de funcionamiento del sistema de crecimiento por *spin-coating*, generando una facilidad experimental en nuestro laboratorio.

El dispositivo fue utilizado en la activación por centros de nucleación de ZnO sobre vidrio para la obtención por una técnica hidrotermal de nanovarillas de ZnO. Las

nanovarillas a su vez, pueden ser aplicadas en celdas solares nanoestructuradas.

La generación de estos resultados resalta el valor universal que tienen a nivel experimental los talleres de fabricación de piezas y dispositivos, donde aún con escasos recursos es posible dar soluciones que apoyen las líneas de trabajo trazadas por nuestros investigadores.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a S. Larramendi y R. Díaz Suárez por fructíferas discusiones. También al Abdus Salam ICTP Visiting Programme por proveer financiamiento para estancias de I.C. en el IMRE.

I. C. agradece a VINNOVA under the VINNMER Marie Curie Incoming project "Light Energy" (LiEn), project No. 2015-01513, por financiamiento parcial.

REFERENCIAS

- [1] D. Lincot, MRS Bulletin 35, 778 (2010).
- [2] M. Kokotov and G. Hodes, J. Mater. Chem. 19, 3847 (2009).
- [3] L. E. Greene, M. Law, D. H. Tan, M. Montano, J. Goldberger, G. Somorjai and P. Yang, Nano Lett. 5, 1231 (2005).
- [4] J. Qiu, X. Li, W. Yu, X. Gao, W. He, S.-J. Park, Y.-H. Hwang, H.-K. Kim, Thin Solid Films 517, 626 (2008).
- [5] Y. Dimitriev, Y. Ivanova, R. Iordanova, J. Univ. Chem. Technol. Metall. 43, 181 (2008).
- [6] A. E. Danks, S. R. Hall and Z. Schnepf, Mater. Horiz. 3, 91 (2016).
- [7] L. Znaidi, Mat. Sci. and Engng. B 174, 18 (2010).

ESTUDIO DEL ÁTOMO $H\pi$ BAJO PERTURBACIONES

STUDY OF $H\pi$ ATOM THROUGH PERTURBATIONS

A. DELGADO SOLANO^{a†}, J. A. MENDOZA SUÁREZ^aDepartamento de Física y Geología, Universidad de Pamplona Colombia, akkar2230@gmail.com[†][†] autor para la correspondencia

Recibido 15/10/2017; Aceptado 30/10/2017

A continuación se realiza el estudio del átomo hidrógeno piónico $H\pi$, mediante una teoría local efectiva, la cual podría generalizar los estados ligados hadrónicos, permitiendo la superposición de los potenciales fuertes y electromagnéticos [1]. Se desarrolla el estado ligado $H\pi$, con interacciones fuertes como perturbaciones a un sistema electromagnético, a bajas energías (teoría efectiva local). Primero se deducen las ecuaciones del cambio en los niveles de energía y la tasa de decaimiento del sistema, siempre en el estado base de interacción s . A través de la condición de equivalencia dichas expresiones están dadas en términos de las longitudes de dispersión de ondas s . El principal objetivo es encontrar una solución al sistema de manera simultánea y obtener una región convergente de valores para las longitudes de dispersión de ondas s .

In this work the study of the propionic hydrogen atom $H\pi$ is performed through effective local theory, which might generalize hadronic bound states, allowing overlapping and strong electromagnetic potentials [1]. It develops the bounded state $H\pi$, with strong interactions as perturbations to an electromagnetic system, at low energies (local effective theory). First we deduce the equations of the change in energy levels and the decay rate of the system, always in the base state of interaction s ; Through of the equivalence condition these expressions are given in terms of the wave scattering lengths s . The main objective is to find a solution to the system simultaneously and obtain a convergent region of values for the wavelength dispersions of s .

PACS: Hadronic atoms, 36.10.-k; scattering, 13.85.Dz; scattering length s-waves, 11.80.Et; low energy, 11.80.Et

I. INTRODUCCIÓN

El átomo $H\pi$, similar al átomo de hidrógeno, es un estado ligado creado principalmente por las interacciones electromagnéticas. La diferencia está en la estructura interna del pión, la cual genera una perturbación al potencial del sistema debido a las interacciones fuertes que se presentan entre los quarks del protón y el pión. Ya que el radio de Bohr en el estado base de energía para el átomo $H\pi$ es mayor que el radio de interacciones fuertes (para el átomo $H\pi$ el radio en el estado base es aproximadamente $220fm$, mientras el límite máximo para las interacciones fuertes esta alrededor de los $10fm$ [1]) esta perturbación es más significativa en el estado base, mientras que se hace menos evidente para niveles de energía superiores. Por esta razón, el estudio de este cambio en el espectro de energía puede ser tratado mediante la teoría de perturbaciones a bajas energías, lo que hace todo el tratamiento una teoría efectiva local.

La importancia de este tema se debe principalmente al desarrollo de una teoría que aunque efectiva local, busca generalizar las interacciones entre hadrones a bajas energías. Además, en este tipo de estados ligados se acoplan tanto interacciones fuertes como electromagnéticas, lo cual podría arrojar nuevas referencias para tratar el problema de gran unificación.

II. ÁTOMO HIDRÓGENO PIÓNICO

El átomo $H\pi$ es un estado ligado formado por un protón p y un pión π^- . La función de onda en el estado base para este

átomo esta dada por [2]:

$$|H\pi(\mathbf{P})\rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3k_{\pi^-} d^3k_p \delta^3(\mathbf{P} - \mathbf{k}_{\pi^-} - \mathbf{k}_p)}{\sqrt{2E_{\pi^-}(\mathbf{k}_{\pi^-})} \sqrt{2E_p(\mathbf{k}_p)}} \times \sqrt{2E_0(\mathbf{k}_{\pi^-} + \mathbf{k}_p)} \Phi_0(\mathbf{k}_{\pi^-}) |\pi^-(\mathbf{k}_{\pi^-}) p(\mathbf{k}_p)\rangle. \quad (1)$$

Aquí $E_0(\mathbf{k}_{\pi^-} + \mathbf{k}_p)$ es la energía total del átomo $H\pi$ en el estado base definida como:

$$E_0(\mathbf{k}_{\pi^-} + \mathbf{k}_p) = \sqrt{M^2 + |\mathbf{P}|^2}; \quad (2)$$

donde $\mathbf{P}$ el momento de estado $H\pi$, y $M = m_p + m_{\pi^-}$ su masa; $\Phi_0(\mathbf{k}_{\pi^-})$ la función de onda del pión ligado al protón en su estado base, en el espacio de momento. La cual esta normalizada por:

$$\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} |\Phi_0(\mathbf{k}_{\pi^-})|^2 = 1. \quad (3)$$

El ket $|\pi^-(\mathbf{k}_{\pi^-}) p(\mathbf{k}_p)\rangle$ es el vector estado de la interacción pión-protón definido por [3]:

$$|\pi^-(\mathbf{k}_{\pi^-}) p(\mathbf{k}_p)\rangle = a_{\pi^-}^\dagger(\mathbf{k}_{\pi^-}) a_p^\dagger(\mathbf{k}_p) |0\rangle; \quad (4)$$

con $a_{\pi^-}^\dagger(\mathbf{k}_{\pi^-})$ y $a_p^\dagger(\mathbf{k}_p)$ los operadores creación para el protón y del pión a partir del estado vacío. Para estos operadores están definidas las reglas de conmutación y anticonmutación [4].

III. PARÁMETROS DEL ÁTOMO $H\pi$

La interferencia entre los potenciales de interacciones electromagnéticas y fuertes, causan un cambio en los niveles

de energía para el estado ligado $p + \pi^-$, en comparación al átomo de hidrógeno. Ya que el π^- más masivo que el electrón, se ve atraído por el protón, cayendo a través de los orbitales energéticos hasta que es frenado bruscamente debido a las interacciones fuertes. Este repentino frenado se ve reflejado en una emisión de rayos X. Esta interacción produce un corrimiento ϵ en el nivel energético, ver figura 1), el cual es más evidente en el estado base de energía [5].

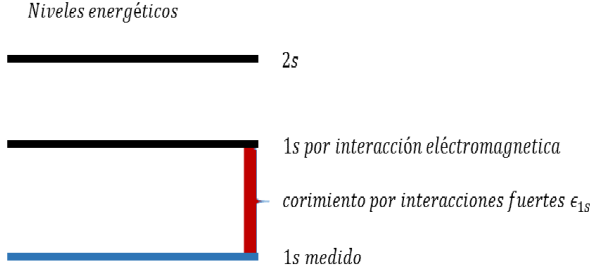


Figura 1. Corrimiento del nivel energético debido a interacciones fuertes.

Por otro lado, las interacciones fuertes, hacen que el estado ligado sea inestable, luego existen la tasa de decaimiento y su respectiva vida media. La relación entre estos dos parámetros y la matriz de interacción esta dada por [2] [6]:

$$\lim_{TV \rightarrow \infty} \frac{\langle H\pi(\mathbf{P}) | \mathbb{T} | H\pi(\mathbf{P}) \rangle}{2E_0(\mathbf{P})TV} \Big|_{\mathbf{P}=0} = -\epsilon_{1s} + i \frac{\Gamma_{1s}}{2}. \quad (5)$$

En teoría de perturbaciones la unitariedad de la matriz de interacción es importante, ya que permite realizar la siguiente descomposición [4]:

$$S = 1 + i\mathbb{T}; \quad (6)$$

donde $\mathbb{T}$ es la perturbación al sistema. Ya que esta perturbación esta dada por interacciones fuertes, se relaciona con la energía de interacciones fuertes $\mathbb{T} = F(\mathcal{Q}_{st})$, donde $\mathcal{Q}_{st}$ es la densidad lagrangiana de la interacción.

Si aplicamos la serie de Dyson [7], considerando solo dos ordenes en la expansión se aprecia que la perturbación está dada por:

$$\mathbb{T} = - \int d^4x_1 \mathcal{Q}_i(x_1) + \frac{i}{2} \int d^4x_1 d^4x_2 T[\mathcal{Q}_i(x_1) \mathcal{Q}_i(x_2)]. \quad (7)$$

El valor esperado de la perturbación para el átomo $H\pi^-$ es:

$$\begin{aligned} \langle H\pi(\mathbf{P}') | \mathbb{T} | H\pi(\mathbf{P}) \rangle &= -\langle H\pi(\mathbf{P}') | \int d^4x_1 \mathcal{Q}_1(x_1) | H\pi(\mathbf{P}) \rangle + \\ &\frac{i}{2} \langle H\pi(\mathbf{P}') | \int d^4x_1 d^4x_2 T[\mathcal{Q}_1(x_1) \mathcal{Q}_2(x_2)] | H\pi(\mathbf{P}) \rangle. \end{aligned}$$

Debido a la naturaleza de la matriz de transición en el proceso de perturbación se tiene:

$$\begin{aligned} \langle H\pi(\mathbf{P}') | \mathbb{T} | H\pi(\mathbf{P}) \rangle &= (2\pi)^4 \delta^4(\mathbf{P} - \mathbf{P}') [-\langle H\pi(\mathbf{P}') | \mathcal{Q}(0) | H\pi(\mathbf{P}) \rangle \\ &+ \frac{i}{2} \int d^4x \langle H\pi(\mathbf{P}') | T[\mathcal{Q}(x) \mathcal{Q}(0)] | H\pi(\mathbf{P}) \rangle]. \quad (8) \end{aligned}$$

El término $(2\pi)^4 \delta^4(\mathbf{P} - \mathbf{P}')$ está definido como el cuadvolumen TV para $\mathbf{P} = \mathbf{P}'$ [6], luego:

$$\begin{aligned} \frac{\langle H\pi(\mathbf{P}') | \mathbb{T} | H\pi(\mathbf{P}) \rangle}{TV} &= -\langle H\pi(\mathbf{P}') | \mathcal{Q}(0) | H\pi(\mathbf{P}) \rangle \\ &+ \frac{i}{2} \int d^4x \langle H\pi(\mathbf{P}') | T[\mathcal{Q}(x) \mathcal{Q}(0)] | H\pi(\mathbf{P}) \rangle \quad (9) \end{aligned}$$

Ya que el espacio para el sistema no es limitado $TV \rightarrow \infty$, y:

$$\begin{aligned} \lim_{TV \rightarrow \infty} \frac{\langle H\pi(\mathbf{P}') | \mathbb{T} | H\pi(\mathbf{P}) \rangle}{TV} &= -\langle H\pi(\mathbf{P}') | \mathcal{Q}(0) | H\pi(\mathbf{P}) \rangle \\ &+ \frac{i}{2} \int d^4x \langle H\pi(\mathbf{P}') | T[\mathcal{Q}(x) \mathcal{Q}(0)] | H\pi(\mathbf{P}) \rangle. \quad (10) \end{aligned}$$

Comparando las ecuaciones (5) y (10) se tiene que:

$$\epsilon_{1s}^1 = -\frac{1}{2E_0(\mathbf{P})} \langle H\pi(\mathbf{P}) | \mathcal{Q}(0) | H\pi(\mathbf{P}) \rangle \quad (11)$$

$$\Gamma_{1s} = \frac{1}{2E_0(\mathbf{P})} \int_{-\infty}^{\infty} d^4x \langle H\pi(\mathbf{P}) | T[\mathcal{Q}(x) \mathcal{Q}(0)] | H\pi(\mathbf{P}) \rangle. \quad (12)$$

Se ha tomado la representación de ϵ_{1s}^1 como el término de primera aproximación para el corrimiento.

IV. CÁLCULO DE ϵ_{1s}^1

Para desarrollar el cálculo, se retoma función de onda en el estado base del átomo $H\pi$ ecuación (1):

$$\begin{aligned} \epsilon_{1s}^1 &= -\frac{1}{2E_0(\mathbf{P})} \left[\frac{1}{(2\pi)^6} \int \frac{d^3k'_{\pi^-}}{\sqrt{2E_{\pi^-}(\mathbf{k}'_{\pi^-})}} \frac{d^3k'_p}{\sqrt{2E_p(\mathbf{k}'_p)}} \right. \\ &\times \frac{d^3k_{\pi^-}}{\sqrt{2E_{\pi^-}(\mathbf{k}_{\pi^-})}} \frac{d^3k_p}{\sqrt{2E_p(\mathbf{k}_p)}} \times \sqrt{2E_0(\mathbf{k}'_{\pi^-} + \mathbf{k}'_p)} \\ &\times \sqrt{2E_0(\mathbf{k}_{\pi^-} + \mathbf{k}_p)} \delta^3(\mathbf{P}' - \mathbf{k}'_{\pi^-} - \mathbf{k}'_p) \delta^3(\mathbf{P} - \mathbf{k}_{\pi^-} - \mathbf{k}_p) \\ &\times \Phi_0^*(\mathbf{k}'_{\pi^-}) \Phi_0(\mathbf{k}_{\pi^-}) \langle \pi^-(\mathbf{k}'_{\pi^-}) p(\mathbf{k}'_p) | \mathcal{Q}(0) | \pi^-(\mathbf{k}_{\pi^-}) p(\mathbf{k}_p) \rangle \Big]. \quad (13) \end{aligned}$$

El factor del valor esperado de $\mathcal{Q}(0)$ es la amplitud del proceso. Para solucionar las integrales con respecto a $\mathbf{k}_p$ y $\mathbf{k}'_p$, se aplica $\delta(\mathbf{P} - \mathbf{k}_{\pi^-} - \mathbf{k}_p) = \delta(\mathbf{k}_p - (\mathbf{P} - \mathbf{k}_{\pi^-}))$ [8]. Se cumple así el principio de conservación de la cantidad de movimiento; $\mathbf{P} = \mathbf{k}_{\pi^-} + \mathbf{k}_p$, luego $\mathbf{k}_p = \mathbf{P} - \mathbf{k}_{\pi^-}$; entonces:

$$\begin{aligned} \epsilon_{1s}^1 &= -\frac{1}{2E_0(\mathbf{P})} \left[\frac{T}{(2\pi)^6} \int \frac{d^3k'_{\pi^-} \sqrt{2E_0(\mathbf{P}')}}{\sqrt{2E_{\pi^-}(\mathbf{k}'_{\pi^-})}} \right. \\ &\times \left. \frac{d^3k_{\pi^-} \sqrt{2E_0(\mathbf{P})}}{\sqrt{2E_{\pi^-}(\mathbf{k}_{\pi^-})}} \frac{\Phi_0^*(\mathbf{k}'_{\pi^-}) \Phi_0(\mathbf{k}_{\pi^-})}{\sqrt{2E_p(\mathbf{P} - \mathbf{k}_{\pi^-})} \sqrt{2E_p(\mathbf{P}' - \mathbf{k}'_{\pi^-})}} \right]; \quad (14) \end{aligned}$$

donde T es la amplitud. Considerando que la interacción es vista desde el marco de referencia del centro de masa, entonces el estado ligado $H\pi$ está en reposo, luego $\mathbf{P} = \mathbf{P}' = 0$,

lo que implica que $\mathbf{k}_{\pi^-} + \mathbf{k}_p = 0$ y $|\mathbf{k}_{\pi^-}| = |\mathbf{k}_p|$. Además considerando los conmutadores para los momentos [9], $\mathbf{k}'_{\pi^-} = \mathbf{k}_{\pi^-} \equiv \mathbf{k}$; luego:

$$\epsilon_{1s}^1 = -T \left(\int \frac{d^3k \Phi_0(\mathbf{k})}{(2\pi)^3 \sqrt{2E_{\pi^-}(\mathbf{k}) 2E_p(\mathbf{k})}} \right)^2 \quad (15)$$

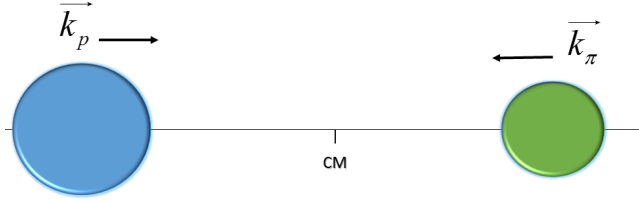


Figura 2. Interacción $p + \pi^-$ vista desde el marco de referencia de centro de masa del sistema.

En este caso consideramos el proceso $\pi^- + p \rightarrow \pi^- + p$. La amplitud T para este proceso se obtiene por simetría de Isospin [10]. Ya que esta interacción se ha considerado con interacciones fuertes de baja energía, se puede aplicar la condición de equivalencia, en términos de las longitudes de dispersión de ondas s [1]:

$$T = \frac{8\pi}{3} (m_{\pi^-} + m_p) (2a_0^{1/2} + a_0^{3/2}); \quad (16)$$

luego:

$$\epsilon_{1s}^1 = -\frac{1}{3\pi^2} (m_{\pi^-} + m_p) (2a_0^{1/2} + a_0^{3/2}) \left(\int \frac{d^3k \Phi_0(\mathbf{k})}{\sqrt{2E_{\pi^-}(\mathbf{k}) 2E_p(\mathbf{k})}} \right)^2. \quad (17)$$

En el límite de bajas energías, la masa del protón se hace muy grande en comparación con el momento $m_p \gg k$:

$$\sqrt{2E_{\pi^-}(\mathbf{k}) 2E_p(\mathbf{k})} = 2 \sqrt{m_p} (m_{\pi^-} + k^2)^{1/4}. \quad (18)$$

Obteniéndose:

$$\epsilon_{1s}^1 = -\frac{2\pi}{3\mu} (2a_0^{1/2} + a_0^{3/2}) \left(\frac{\sqrt{m_{\pi^-}}}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3k \Phi_0(\mathbf{k})}{(m_{\pi^-} + k^2)^{1/4}} \right)^2. \quad (19)$$

Donde se ha introducido la masa reducida del sistema $H\pi$. Para resolver esta última integral es necesario considerar la función de onda en el espacio de momento $\Phi_0(\mathbf{k})$, la cual está dada por [2]:

$$\Phi_0(\mathbf{k}) = \sqrt{4\pi} \int_0^\infty j_0(kr) R_0(r) r^2 dr, \quad (20)$$

aquí $j_l(kr)$ son las funciones esféricas de Bessel y $R_0(r)$ la función de onda radial para el átomo de hidrógeno. Tomando $d^3k = d\Omega k^2 dk$, y ya que el resto de la función es independiente de las coordenadas angulares, la integral de ángulo sólido es

$4\pi; \epsilon_{1s}^1$ puede ser escrito:

$$\epsilon_{1s}^1 = -\frac{2\pi}{3\mu} (2a_0^{1/2} + a_0^{3/2}) \left(\frac{4\pi \sqrt{4\pi} \sqrt{m_{\pi^-}}}{(2\pi)^3} \times \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{dk dr j_0(kr) R_0(r) r^2 k^2}{(m_{\pi^-}^2 + k^2)^{1/4}} \right)^2. \quad (21)$$

Introduciendo la función de onda para el átomo de hidrógeno en el estado base para $r = 0$ y las funciones de Bessel [8]:

$$j_l(x) = (-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \left(\frac{\sin x}{x} \right). \quad (22)$$

Sustituyendo en ϵ_{1s}^1 se tiene:

$$\epsilon_{1s}^1 = -\frac{2\pi}{3\mu} (2a_0^{1/2} + a_0^{3/2}) \left(\frac{2\sqrt{m_{\pi^-}}}{\pi} \Psi_{1s}(0) \int_0^\infty \exp\left(-\frac{r}{a}\right) r dr \times \int_0^\infty \frac{\sin(kr) k}{(m_{\pi^-}^2 + k^2)^{1/4}} dk \right)^2. \quad (23)$$

La solución de esta integral es compleja; para solucionarla se deben aplicar algunas propiedades de las funciones de Bessel. Primero recordando que $k \sin(kr) = -\frac{d}{dr} [\cos(kr)]:$

$$\epsilon_{1s}^1 = -\frac{2\pi}{3\mu} (2a_0^{1/2} + a_0^{3/2}) \left(-\frac{2\sqrt{m_{\pi^-}}}{\pi} \Psi_{1s}(0) \times \int_0^\infty \exp\left(-\frac{r}{a}\right) r dr \frac{d}{dr} \int_0^\infty \frac{\cos(kr)}{(m_{\pi^-}^2 + k^2)^{1/4}} dk \right)^2.$$

Usando la fórmula [11]:

$$K_\nu(xz) = \frac{\Gamma(\nu + \frac{1}{2})(2z)^\nu}{\sqrt{\pi} x^\nu} \int_0^\infty \frac{\cos(xt) dt}{(t^2 + z^2)^{\nu+1/2}}; \quad (24)$$

donde K_ν son las funciones de Bessel modificadas de segunda especie y Γ la función gamma. Fácilmente se puede apreciar que $r = x$, $t = k$ y $z = m_{\pi^-}$, con $\nu = -1/4$, entonces:

$$\epsilon_{1s}^1 = -\frac{2\pi}{3\mu} (2a_0^{1/2} + a_0^{3/2}) \left(-\frac{2^{5/4} m_{\pi^-}^{3/4}}{\sqrt{\pi}} \frac{\Psi_{1s}(0)}{\Gamma(\frac{1}{4})} \times \int_0^\infty \exp\left(-\frac{r}{a}\right) r dr \frac{d}{dr} \left[K_{\frac{1}{4}}(m_{\pi^-} r) r^{-1/4} \right] \right)^2.$$

Ahora haciendo un cambio de variable;

$$z = m_{\pi^-} r \rightarrow r = \frac{z}{m_{\pi^-}} \rightarrow r^{-1/4} = z^{-1/4} m_{\pi^-}^{1/4};$$

$$dr = \frac{dz}{m_{\pi^-}} \rightarrow \frac{d}{dr} = m_{\pi^-} \frac{d}{dz};$$

y tomando la relación [11]:

$$\frac{1}{z^k} \frac{d^k}{dz^k} [z^{-\nu} K_\nu(z)] = (-1)^k z^{-\nu-k} K_{\nu+k}(z); \quad (25)$$

se tiene:

$$\epsilon_{1s}^1 = -\frac{2\pi}{3\mu}(2a_0^{1/2} + a_0^{3/2}) \left(\frac{2^{5/4}}{\sqrt{\pi}} \frac{\Psi_{1s}(0)}{\Gamma(\frac{1}{4})} \right) \times \int_0^\infty z^{3/4} \exp((-z/m_{\pi^-} a)) K_{\frac{5}{4}}(z) dz \quad (26)$$

Para resolver esta integral se considera la serie de Taylor para $\exp(-z/m_{\pi^-} a)$ e introduciendo el radio de Bohr para el átomo $H\pi$:

$$\epsilon_{1s}^1 = -\frac{2\pi}{3\mu}(2a_0^{1/2} + a_0^{3/2}) \left(\frac{2^{5/4}}{\sqrt{\pi}} \frac{\Psi_{1s}(0)}{\Gamma(\frac{1}{4})} \right) \times \sum_{n=0}^\infty \frac{(-1)^n}{n!} \left(\frac{\mu\alpha}{m_{\pi^-}} \right)^n \int_0^\infty z^{3/4+n} K_{\frac{5}{4}}(z) dz \quad (27)$$

Aplicando la fórmula [11]:

$$\int_0^\infty x^\mu K_\nu(x) dx = 2^{\mu-1} \Gamma\left(\frac{\mu+\nu+1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\mu-\nu+1}{2}\right);$$

con $\mu = \frac{3}{4} + n$ y $\nu = \frac{5}{4}$; entonces:

$$\epsilon_{1s}^1 = -\frac{2\pi}{3\mu}(2a_0^{1/2} + a_0^{3/2}) [\Psi_{1s}(0)]^2 \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}\Gamma(\frac{1}{4})} \right) \times \sum_{n=0}^\infty \frac{(-1)^n}{n!} 2^{n+1} \left(\frac{\mu\alpha}{m_{\pi^-}} \right)^n \Gamma\left(\frac{3+n}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\frac{1}{2}+n}{2}\right) \quad (28)$$

Ahora se define:

$$O(n) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\Gamma(\frac{1}{4})} \sum_{n=0}^\infty \frac{(-1)^n}{n!} 2^{n+1} \left(\frac{\mu\alpha}{m_{\pi^-}} \right)^n \Gamma\left(\frac{3+n}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\frac{1}{2}+n}{2}\right); \quad (29)$$

entonces ϵ_{1s} puede ser escrito como:

$$\epsilon_{1s}^1 = -\frac{2\pi}{3\mu}(2a_0^{1/2} + a_0^{3/2}) [\Psi_{1s}(0)]^2 (O(n))^2; \quad (30)$$

donde $O(n)$ son términos de correcciones de orden n realizadas a ϵ_{1s}^1 , con $n = 0, 1, 2, 3 \dots$

V. CÁLCULO DE Γ_{1s}

Se retoma la ecuación (12), considerando el producto cronológico de Dyson, y la función de onda del $H\pi$ en el marco de referencia del centro de masa:

$$\begin{aligned} \Gamma_{1s} = & \frac{1}{(2\pi)^6} \left[\int_{-\infty}^\infty d^4x \Theta(-x^0) \int \frac{d^3k'_{\pi^-}}{\sqrt{2E_{\pi^-}(\mathbf{k}'_{\pi^-})}} \frac{d^3k'_p}{\sqrt{2E_p(\mathbf{k}'_p)}} \frac{d^3k_{\pi^-}}{\sqrt{2E_{\pi^-}(\mathbf{k}_{\pi^-})}} \frac{d^3k_p}{\sqrt{2E_p(\mathbf{k}_p)}} \delta^3(\mathbf{k}'_{\pi^-} + \mathbf{k}'_p) \right. \\ & \times \delta^3(\mathbf{k}_{\pi^-} + \mathbf{k}_p) \langle \pi^-(\mathbf{k}'_{\pi^-}) p(\mathbf{k}'_p) | \mathcal{U}(0) \mathcal{U}(x^0) | \pi^-(\mathbf{k}_{\pi^-}) p(\mathbf{k}_p) \rangle \Phi_0^*(\mathbf{k}'_{\pi^-}) \Phi_0(\mathbf{k}_{\pi^-}) + \int_{-\infty}^\infty d^4x \Theta(x^0) \int \frac{d^3k'_{\pi^-}}{\sqrt{2E_{\pi^-}(\mathbf{k}'_{\pi^-})}} \frac{d^3k'_p}{\sqrt{2E_p(\mathbf{k}'_p)}} \\ & \times \frac{d^3k_{\pi^-}}{\sqrt{2E_{\pi^-}(\mathbf{k}_{\pi^-})}} \frac{d^3k_p}{\sqrt{2E_p(\mathbf{k}_p)}} \delta^3(\mathbf{k}'_{\pi^-} + \mathbf{k}'_p) \delta^3(\mathbf{k}_{\pi^-} + \mathbf{k}_p) \Phi_0^*(\mathbf{k}'_{\pi^-}) \Phi_0(\mathbf{k}_{\pi^-}) \langle \pi^-(\mathbf{k}'_{\pi^-}) p(\mathbf{k}'_p) | \mathcal{U}(x^0) \mathcal{U}(0) | \pi^-(\mathbf{k}_{\pi^-}) p(\mathbf{k}_p) \rangle \Big] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{1s} = & \frac{1}{4} \left(\frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3k \Phi_0(\mathbf{k})}{\sqrt{E_{\pi^-}(\mathbf{k}) E_p(-\mathbf{k})}} \right)^2 \left[\int_{-\infty}^\infty d^4x \Theta(-x^0) \langle \pi^-(\mathbf{k}) p(-\mathbf{k}) | \mathcal{U}(0) \mathcal{U}(x^0) | \pi^-(\mathbf{k}) p(-\mathbf{k}) \rangle \right. \\ & \left. + \int_{-\infty}^\infty d^4x \Theta(x^0) \langle \pi^-(\mathbf{k}) p(-\mathbf{k}) | \mathcal{U}(x^0) \mathcal{U}(0) | \pi^-(\mathbf{k}) p(-\mathbf{k}) \rangle \right]. \end{aligned}$$

Ya que se está trabajando sobre un decaimiento, con el fin de no perder información es necesario considerar todos los estados posibles después del proceso. En este caso se considera el canal $\pi^- + p \rightarrow \pi^0 + n$. Los estados para cada partícula sin considerar spin están normalizados y además forman una base completa ortogonal, luego se pueden introducir a la ecuación sin alterarla de la siguiente forma [4]:

$$\begin{aligned}
1 &= \frac{1}{2} \int \frac{d^3 Q_{\pi^-}}{(2\pi)^3 2E_{\pi^-}(\mathbf{Q}_{\pi^-})} \frac{d^3 Q_p}{(2\pi)^3 2E_p(\mathbf{Q}_p)} \times |\pi(\mathbf{Q}_{\pi^-})p(\mathbf{Q}_p)\rangle \langle \pi(\mathbf{Q}_{\pi^-})p(\mathbf{Q}_p)| + \\
&\quad + \frac{1}{2} \int \frac{d^3 Q_{\pi^0}}{(2\pi)^3 2E_{\pi^0}(\mathbf{Q}_{\pi^0})} \frac{d^3 Q_n}{(2\pi)^3 2E_n(\mathbf{Q}_n)} |\pi(\mathbf{Q}_{\pi^0})n(\mathbf{Q}_n)\rangle \langle \pi(\mathbf{Q}_{\pi^0})n(\mathbf{Q}_n)|; \\
\Gamma_{1s} &= \frac{1}{32} \frac{1}{(2\pi)^6} \left(\frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 k \Phi_0(\mathbf{k})}{\sqrt{E_{\pi^-}(\mathbf{k})E_p(-\mathbf{k})}} \right)^2 \left[\int_{-\infty}^{\infty} d^4 x \Theta(-x^0) \int \frac{d^3 Q_{\pi^-}}{E_{\pi^-}(\mathbf{Q}_{\pi^-})} \frac{d^3 Q_p}{E_p(\mathbf{Q}_p)} \langle \pi^-(\mathbf{k})p(-\mathbf{k}) | \mathfrak{L}(0) | \pi^-(\mathbf{Q}_{\pi^-})p(\mathbf{Q}_p) \rangle \right. \\
&\quad \times \langle \pi^-(\mathbf{Q}_{\pi^-})p(\mathbf{Q}_p) | \mathfrak{L}(x^0) | \pi^-(\mathbf{k})p(-\mathbf{k}) \rangle + \int_{-\infty}^{\infty} d^4 x \Theta(x^0) \int \frac{d^3 Q_{\pi^-}}{E_{\pi^-}(\mathbf{Q}_{\pi^-})} \frac{d^3 Q_p}{E_p(\mathbf{Q}_p)} \langle \pi^-(\mathbf{k})p(-\mathbf{k}) | \mathfrak{L}(x^0) | \pi^-(\mathbf{Q}_{\pi^-})p(\mathbf{Q}_p) \rangle \langle \pi^-(\mathbf{Q}_{\pi^-})p(\mathbf{Q}_p) | \\
&\quad \times \mathfrak{L}(0) | \pi^-(\mathbf{k})p(-\mathbf{k}) \rangle + \int_{-\infty}^{\infty} d^4 x \Theta(-x^0) \int \frac{d^3 Q_{\pi^0}}{E_{\pi^0}(\mathbf{Q}_{\pi^0})} \frac{d^3 Q_n}{E_n(\mathbf{Q}_n)} \langle \pi^-(\mathbf{k})p(-\mathbf{k}) | \mathfrak{L}(0) | \pi^0(\mathbf{Q}_{\pi^0})n(\mathbf{Q}_n) \rangle \langle \pi^0(\mathbf{Q}_{\pi^0})n(\mathbf{Q}_n) | \mathfrak{L}(x^0) | \pi^-(\mathbf{k})p(-\mathbf{k}) \rangle \\
&\quad \left. + \int_{-\infty}^{\infty} d^4 x \Theta(x^0) \int \frac{d^3 Q_{\pi^0}}{E_{\pi^0}(\mathbf{Q}_{\pi^0})} \frac{d^3 Q_n}{E_n(\mathbf{Q}_n)} \langle \pi^-(\mathbf{k})p(-\mathbf{k}) | \mathfrak{L}(x^0) | \pi^0(\mathbf{Q}_{\pi^0})n(\mathbf{Q}_n) \rangle \langle \pi^0(\mathbf{Q}_{\pi^0})n(\mathbf{Q}_n) | \mathfrak{L}(0) | \pi^-(\mathbf{k})p(-\mathbf{k}) \rangle \right].
\end{aligned}$$

Ya que Γ_{1s} esta relacionada con un proceso de decaimiento, los estados elásticos están prohibidos [8], entonces no aportan para este cálculo. Solo los procesos de decaimiento se consideran. A los términos de procesos elásticos se les define como el corrimiento en el nivel energético de segunda aproximación ϵ_{1s}^2 , ya que provienen del factor de segundo orden en la serie de Dyson. Luego:

$$\begin{aligned}
\Gamma_{1s} &= \frac{1}{32} \frac{1}{(2\pi)^6} \left(\frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 k \Phi_0(\mathbf{k})}{\sqrt{E_{\pi^-}(\mathbf{k})E_p(-\mathbf{k})}} \right)^2 \left[\int_{-\infty}^{\infty} d^4 x \Theta(-x^0) \int \frac{d^3 Q_{\pi^0}}{E_{\pi^0}(\mathbf{Q}_{\pi^0})} \frac{d^3 Q_n}{E_n(\mathbf{Q}_n)} \langle \pi^-(\mathbf{k})p(-\mathbf{k}) | \mathfrak{L}(0) | \pi^0(\mathbf{Q}_{\pi^0})n(\mathbf{Q}_n) \rangle \langle \pi^0(\mathbf{Q}_{\pi^0}) \right. \\
&\quad \times n(\mathbf{Q}_n) | \mathfrak{L}(x^0) | \pi^-(\mathbf{k})p(-\mathbf{k}) \rangle + \int_{-\infty}^{\infty} d^4 x \Theta(x^0) \int \frac{d^3 Q_{\pi^0}}{E_{\pi^0}(\mathbf{Q}_{\pi^0})} \frac{d^3 Q_n}{E_n(\mathbf{Q}_n)} \langle \pi^-(\mathbf{k})p(-\mathbf{k}) | \mathfrak{L}(x^0) | \pi^0(\mathbf{Q}_{\pi^0})n(\mathbf{Q}_n) \rangle \langle \pi^0(\mathbf{Q}_{\pi^0})n(\mathbf{Q}_n) \\
&\quad \left. \times | \mathfrak{L}(0) | \pi^-(\mathbf{k})p(-\mathbf{k}) \rangle \right]. \tag{31}
\end{aligned}$$

Mientras que:

$$\begin{aligned}
\epsilon_{1s}^2 &= \frac{1}{32} \frac{1}{(2\pi)^6} \left(\frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 k \Phi_0(\mathbf{k})}{\sqrt{E_{\pi^-}(\mathbf{k})E_p(-\mathbf{k})}} \right)^2 \\
&\quad \times \left[\int_{-\infty}^{\infty} d^4 x \Theta(-x^0) \int \frac{d^3 Q_{\pi^-}}{E_{\pi^-}(\mathbf{Q}_{\pi^-})} \frac{d^3 Q_p}{E_p(\mathbf{Q}_p)} \right. \\
&\quad \times \langle \pi^-(\mathbf{k})p(-\mathbf{k}) | \mathfrak{L}(0) | \pi^-(\mathbf{Q}_{\pi^-})p(\mathbf{Q}_p) \rangle \langle \pi^-(\mathbf{Q}_{\pi^-})p(\mathbf{Q}_p) | \\
&\quad \times \mathfrak{L}(x^0) | \pi^-(\mathbf{k})p(-\mathbf{k}) \rangle + \int_{-\infty}^{\infty} d^4 x \Theta(x^0) \int \frac{d^3 Q_{\pi^-}}{E_{\pi^-}(\mathbf{Q}_{\pi^-})} \\
&\quad \times \frac{d^3 Q_p}{E_p(\mathbf{Q}_p)} \langle \pi^-(\mathbf{k})p(-\mathbf{k}) | \mathfrak{L}(x^0) | \pi^-(\mathbf{Q}_{\pi^-})p(\mathbf{Q}_p) \rangle \\
&\quad \left. \times \langle \pi^-(\mathbf{Q}_{\pi^-})p(\mathbf{Q}_p) | \mathfrak{L}(0) | \pi^-(\mathbf{k})p(-\mathbf{k}) \rangle \right] \tag{32}
\end{aligned}$$

coordenadas espaciales y temporales, resolviendo las integrales de momento se tiene:

$$\begin{aligned}
\Gamma_{1s} &= \frac{1}{32} \frac{1}{(2\pi)^3} \left(\frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 k \Phi_0(\mathbf{k})}{\sqrt{E_{\pi^-}(\mathbf{k})E_p(-\mathbf{k})}} \right)^2 \left[\int_{-\infty}^{\infty} d^4 x \Theta(-x^0) \right. \\
&\quad \times \int \frac{d^3 Q_{\pi^0}}{E_{\pi^0}(\mathbf{Q}_{\pi^0})} \frac{d^3 Q_n}{E_n(\mathbf{Q}_n)} \delta^3(\mathbf{Q}_{\pi^0} + \mathbf{Q}_n) \langle \pi^-(\mathbf{k})p(-\mathbf{k}) | \mathfrak{L}(0) | \pi^0 \\
&\quad \times (\mathbf{Q}_{\pi^0})n(\mathbf{Q}_n) \rangle \langle \pi^0(\mathbf{Q}_{\pi^0})n(\mathbf{Q}_n) | \mathfrak{L}(x^0) | \pi^-(\mathbf{k})p(-\mathbf{k}) \rangle \\
&\quad + \int_{-\infty}^{\infty} d^4 x \Theta(x^0) \int \frac{d^3 Q_{\pi^0}}{E_{\pi^0}(\mathbf{Q}_{\pi^0})} \frac{d^3 Q_n}{E_n(\mathbf{Q}_n)} \delta^3(\mathbf{Q}_{\pi^0} + \mathbf{Q}_n) \langle \pi^-(\mathbf{k})p(-\mathbf{k}) \\
&\quad \left. \times | \mathfrak{L}(x^0) | \pi^0(\mathbf{Q}_{\pi^0})n(\mathbf{Q}_n) \rangle \langle \pi^0(\mathbf{Q}_{\pi^0})n(\mathbf{Q}_n) | \mathfrak{L}(0) | \pi^-(\mathbf{k})p(-\mathbf{k}) \rangle \right].
\end{aligned}$$

Continuando con el cálculo de Γ_{1s} y separando las Utilizando la relación entre las funciones delta y escalón para

mesones [4]:

$$\Theta(\pm x^0) = 2\pi\delta(E_{\pi^0}(\mathbf{Q}_{\pi^0}) + E_n(\mathbf{Q}_n) - E_{\pi^-}(\mathbf{k}) - E_p(\mathbf{k}))\delta(x^0).$$

Integrando en el límite de bajas energías $k \rightarrow 0$ con respecto a las masas de las partículas, luego:

$$\Gamma_{1s} = \frac{(T_{\pi^-p \rightarrow \pi^0 n})^2}{8(2\pi)} \left(\frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 k \Phi_0(\mathbf{k})}{\sqrt{E_{\pi^-}(\mathbf{k})E_p(-\mathbf{k})}} \right)^2 \times \left[\int \frac{dQ Q^2 \delta[E_{\pi^0}(\mathbf{Q}) + E_n(\mathbf{Q}) - m_{\pi^-} - m_p]}{E_{\pi^0}(\mathbf{Q})E_n(-\mathbf{Q})} \right]. \quad (33)$$

Realizando un cambio de variable en la integral así:

$$\frac{dE}{E} = \frac{Q dQ}{\sqrt{m_{\pi^0}^2 + Q^2} \sqrt{m_n^2 + Q^2}}; \quad (34)$$

Se tiene:

$$\Gamma_{1s} = \frac{(T_{\pi^-p \rightarrow \pi^0 n})^2 Q}{8(2\pi)(m_{\pi^-} + m_p)} \left(\frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 k \Phi_0(\mathbf{k})}{\sqrt{E_{\pi^-}(\mathbf{k})E_p(-\mathbf{k})}} \right)^2;$$

Sustituyendo la amplitud por simetría de Isospín [10], junto con la condición de equivalencia y la masa reducida del sistema se llega a:

$$\Gamma_{1s} = \frac{8\pi Q}{9\mu} \left[T^{\frac{3}{2}} - T^{\frac{1}{2}} \right]^2 \left(\frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 k \Phi_0(\mathbf{k}) \sqrt{m_{\pi^-} m_p}}{\sqrt{E_{\pi^-}(\mathbf{k})E_p(-\mathbf{k})}} \right)^2,$$

utilizando la relación (18):

$$\Gamma_{1s} = \frac{8\pi Q}{9\mu} \left[T^{\frac{3}{2}} - T^{\frac{1}{2}} \right]^2 \left(\frac{\sqrt{m_{\pi^-}}}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 k \Phi_0(\mathbf{k})}{(m_{\pi^-} + k^2)^{1/4}} \right)^2.$$

Esta última integral es la misma de la ecuación (19), la cual se resolvió para calcular ϵ_{1s} . Utilizando este resultado y en términos de las longitudes de dispersión para ondas s:

$$\Gamma_{1s} = \frac{8}{9} \pi \frac{Q}{\mu} \left[a_0^{\frac{3}{2}} - a_0^{\frac{1}{2}} \right]^2 [\Psi_{1s}(0)]^2 (O(n))^2. \quad (35)$$

VI. CÁLCULO DE ϵ_{1s}^2

Retomando la ecuación (32) y procediendo como el calculó anterior, pero usando la relación entre la función escalón y la función δ ; que en este caso está dada por [4]:

$$\Theta(\pm x) = \frac{\delta(x)}{E_{\pi^-}(\mathbf{Q}_{\pi^-}) + E_p(\mathbf{Q}_p) - E_{\pi^-}(\mathbf{k}) - E_p(-\mathbf{k})}; \quad (36)$$

Resolviendo las integrales se tiene:

$$\epsilon_{1s}^2 = \frac{(T_{\pi^-p \rightarrow \pi^- p})^2}{16(2\pi)^3} \left(\frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 k \Phi_0(\mathbf{k})}{\sqrt{E_{\pi^-}(\mathbf{k})E_p(-\mathbf{k})}} \right)^2 \times \left[\int \frac{d^3 Q}{E_{\pi^-}(\mathbf{Q})E_p(-\mathbf{Q})[E_{\pi^-}(\mathbf{Q}) + E_p(-\mathbf{Q}) - E_0]} \right]. \quad (37)$$

Donde $E_0 = E_{\pi^-}(\mathbf{k}) + E_p(-\mathbf{k})$. En este caso la amplitud es la misma que para ϵ_{1s} en primera aproximación, ya que el proceso es el mismo, entonces sustituyendo (9) y realizando la integral angular en coordenadas esféricas, ya considerando bajas energías se tiene:

$$\epsilon_{1s}^2 = 2(m_{\pi^-} + m_p)^2 (2T^{1/2} + T^{3/2})^2 \times \left(\frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 k \Phi_0(\mathbf{k})}{\sqrt{E_{\pi^-}(\mathbf{k})E_p(-\mathbf{k})}} \right)^2 \times \left[\int \frac{dQ Q^2}{E_{\pi^-}(\mathbf{Q})E_p(-\mathbf{Q})[E_{\pi^-}(\mathbf{Q}) + E_p(-\mathbf{Q}) - M]} \right]. \quad (38)$$

Con $M = m_{\pi^-} - m_p$. Esta última integral es logarítmicamente divergente, un problema que no se había presentado antes. Para solucionarlo se aplica la condición a bajas energías y las teorías efectivas locales. En el caso del átomo $H\pi$ el momento generalizado de las partículas no puede exceder el valor de $Q = \alpha\mu$ [9]. De esta manera, el desarrollo y la teoría solo son validas para este intervalo de energías, lo que la hace una teoría efectiva local. Ya que $\alpha\mu = 0.887$ MeV [12], si lo comparamos con las masas de las partículas involucradas $m_{\pi^-} = 139.57$ MeV y $m_p = 938.272$ MeV; se puede apreciar que el máximo valor de Q es muy pequeño comparado con las masas. Según esto es posible realizar una expansión de las energías de la siguiente forma¹:

$$\sqrt{m_{\pi^-}^2 + Q^2} = m_{\pi^-} + \frac{Q^2}{2m_{\pi^-}}, \quad (39)$$

$$\sqrt{m_p^2 + Q^2} = m_p + \frac{Q^2}{2m_p}; \quad (40)$$

entonces:

$$\epsilon_{1s}^2 = 2(m_{\pi^-} + m_p)^2 (2T^{1/2} + T^{3/2})^2 \left(\frac{1}{(2\pi)^3} \times \int \frac{d^3 k \Phi_0(\mathbf{k})}{\sqrt{E_{\pi^-}(\mathbf{k})E_p(-\mathbf{k})}} \right)^2 \left[\int_0^{\alpha\mu} \frac{dQ Q^2}{\left(m_{\pi^-} + \frac{Q^2}{2m_{\pi^-}}\right)\left(m_p + \frac{Q^2}{2m_p}\right)} \right. \\ \left. \times \frac{1}{m_{\pi^-} + \frac{Q^2}{2m_{\pi^-}} + m_p + \frac{Q^2}{2m_p} - m_{\pi^-} - m_p} \right]. \quad (41)$$

Resolviendo la integral para Q :

$$\epsilon_{1s}^2 = 4\alpha m_{\pi^-} m_p (2T^{1/2} + T^{3/2})^2 \times \left(\frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 k \Phi_0(\mathbf{k})}{\sqrt{E_{\pi^-}(\mathbf{k})E_p(-\mathbf{k})}} \right)^2. \quad (42)$$

De forma análoga la última integral la podemos llevar a la forma de (19) usando la relación (18):

$$\epsilon_{1s}^2 = 4\alpha (2T^{1/2} + T^{3/2})^2 \left(\frac{\sqrt{m_{\pi^-}}}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 k \Phi_0(\mathbf{k})}{(m_{\pi^-} + k^2)^{1/4}} \right)^2.$$

¹La elección del valor de $\alpha\mu$, como el acotamiento del momento que rompe la indeterminación en la integral, se debe a que el potencial electromagnético es de la forma $\frac{1}{r}$, y ya que se toma el estado base de energía, entonces $r = \frac{1}{\alpha\mu}$, este es el radio de Bohr para el hidrógeno piónico.

Luego en términos de $a_0^{1/2}$ y $a_0^{3/2}$:

$$\epsilon_{1s}^2 = 4\alpha (2a_0^{1/2} + a_0^{3/2})^2 [\Psi_{1s}(0)]^2 (O(n))^2. \quad (43)$$

VII. ANÁLISIS DE RESULTADOS

Las ecuaciones (30,35,43), proporcionan una expresión para calcular directamente el valor numérico del cambio y ancho de los niveles de energía en el estado base del átomo $H\pi$. Sin embargo, dicho cálculo está condicionado a los valores de las longitudes de dispersión de ondas s . Estas relaciones forman un conjunto de ecuaciones, el cual puede ser solucionado, tomando como referencia los valores experimentales para ϵ_{1s} y Γ_{1s} . Los valores experimentales medidos para estos observables han sido publicados por el grupo *Pionic Hydrogen Collaboration* en *The Paul Scherrer Institute* (PSI), un centro de investigaciones altamente avanzado de última tecnología, ubicado en Suiza. Los resultados son [9] [13]:

$$\epsilon_{1s} = -7.120 \pm 0.011 \text{ eV}; \quad \Gamma_{1s} = 0.823 \pm 0.019 \text{ eV}. \quad (44)$$

Primero es fundamental realizar un análisis a la serie $O(n)$ dada por (29), ya que cualquier termino que se desee analizar tiene dependencia directa de este factor. El cálculo desarrollado para cada valor respectivo de n para $O(n)$ desde $n = 0$ hasta $n = 10$ arrojó el resultado mostrado en la tabla (1). Al apreciar estos resultados se puede concluir que a medida que los n_i aumentan el valor de $O(n_i)$ tiende a cero. Esto quiere decir que es una serie convergente, y no hay necesidad de truncamiento.

Tabla 1. Valores de $O(n)$

n	$O(n)$
0	1
1	-0.00484664
2	0.0000302808
3	-1.9568×10^{-7}
4	1.27351×10^{-9}
5	-8.29548×10^{-12}
6	5.39879×10^{-14}
7	-3.50874×10^{-16}
8	2.27704×10^{-18}
9	-1.47566×10^{-20}
10	9.55092×10^{-23}

Por otro lado al realizar toda la sumatoria, el cálculo realizado para $O(n)$ da como resultado que dicha serie converge al valor de:

$$O(n) = 0.995183; \quad (45)$$

Ya que el corrimiento de los niveles de energía está compuesto por dos factores, de primero y segundo orden de perturbación, teniendo en cuenta el signo en la ecuación (11) entonces:

$$\epsilon_{1s} = \frac{2\pi}{3\mu} (2a_0^{1/2} + a_0^{3/2}) [\Psi_{1s}(0)]^2 \left[-(O(n))^2 + (2a_0^{1/2} + a_0^{3/2}) O_2(n) \right]. \quad (46)$$

Donde:

$$O_2(n) = \frac{6\mu\alpha}{\pi} (O(n))^2 = 1.67746 \quad (47)$$

$$\epsilon_{1s} = \frac{2}{3} \mu^2 \alpha^3 (2a_0^{1/2} + a_0^{3/2}) \left[-(0.995183)^2 + (2a_0^{1/2} + a_0^{3/2})(1.6774) \text{ MeV} \right]; \quad (48)$$

donde las unidades de MeV se deben al factor de μ en (47). Análogamente para Γ_{1s} se tiene:

$$\Gamma_{1s} = \frac{8}{9} Q \mu^2 \alpha^3 \left[a_0^{\frac{3}{2}} - a_0^{\frac{1}{2}} \right]^2 (O(n))^2; \quad (49)$$

donde $|Q| = 28.05 \text{ MeV}$ es el momento para el cual la energía se conserva [14]. Según estas ecuaciones se puede hacer un análisis para tres casos, sin correcciones, con correcciones de primer orden y para correcciones de segundo orden. En el caso en que no se consideran correcciones, se tiene las fórmulas *DGBT* [15]:

$$\epsilon_{1s} = \frac{2\pi}{3\mu} (2a_0^{1/2} + a_0^{3/2}) [\Psi_{1s}(0)]^2; \quad (50)$$

$$\Gamma_{1s} = \frac{8}{9} \pi \frac{Q}{\mu} \left[a_0^{\frac{3}{2}} - a_0^{\frac{1}{2}} \right]^2 [\Psi_{1s}(0)]^2. \quad (51)$$

Ahora, si se considera la primera corrección se tiene:

$$\epsilon_{1s} = \frac{2}{3} \mu^2 \alpha^3 (2a_0^{1/2} + a_0^{3/2}) \left[-(0.995183)^2 \right]; \quad (52)$$

mientras que Γ_{1s} esta dada por (49). Finalmente tomando correcciones de segundo orden, ϵ_{1s} esta dado por (48). Usando los valores medidos para ϵ_{1s} y Γ_{1s} , considerando un rango de 4 incertidumbres en cada uno de los casos, con y sin correcciones (fórmulas *DGBT*), se obtuvieron las regiones de convergencia para los valores de las longitudes de dispersión de ondas s . Los resultados son mostrados en las figuras (3), (4), (5):

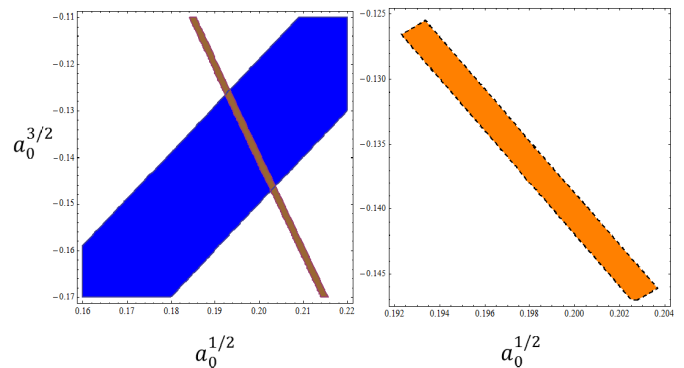


Figura 3. Resultados obtenidos para las longitudes de dispersión de ondas s ; usando las fórmulas *DGBT*. La región café ϵ_{1s} , región azul Γ_{1s} . A la derecha región de convergencia del sistema, a la izquierda la región de convergencia ampliada.

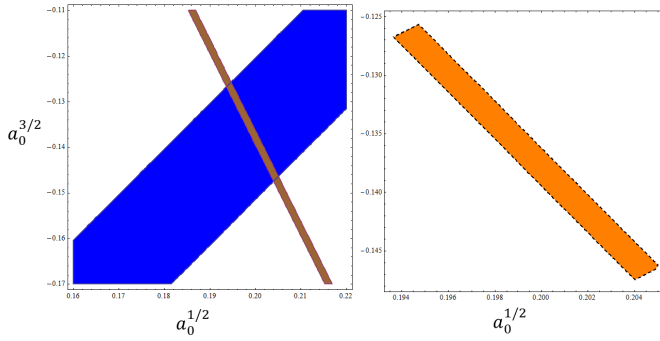


Figura 4. Resultados obtenidos para las longitudes de dispersión de ondas s , con correcciones de primer orden. La región café ϵ_{1s} y azul Γ_{1s} . A la derecha región de convergencia del sistema, a la izquierda la región de convergencia ampliada.

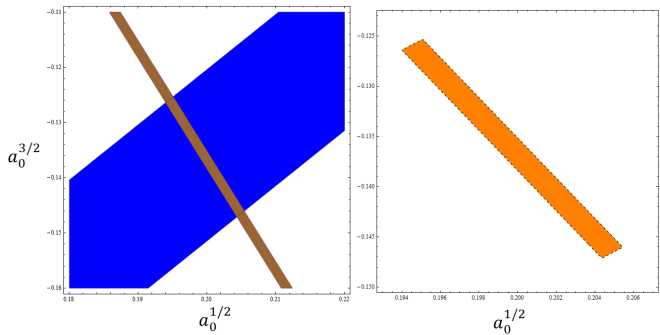


Figura 5. Resultados obtenidos para las longitudes de dispersión de ondas s ; con correcciones de segundo orden. La región café ϵ_{1s} , azul Γ_{1s} . A la derecha región de convergencia del sistema, a la izquierda región de convergencia ampliada.

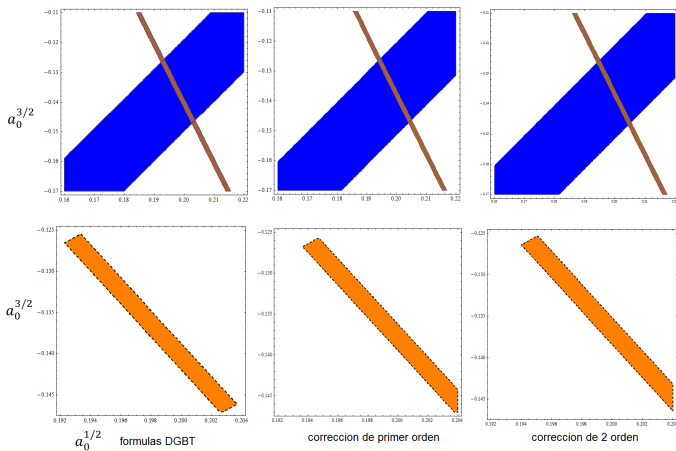


Figura 6. Resultados obtenidos para las longitudes de dispersión de ondas s , considerando los tres casos de correcciones a la misma escala. Región café ϵ_{1s} , azul Γ_{1s} . En la parte superior se presenta la región de convergencia del sistema para las dos soluciones, en la parte inferior se muestra la región de convergencia ampliada.

VIII. CONCLUSIONES

Con un análisis detallado de las regiones que solucionan el sistema de ecuaciones para ϵ_{1s} y Γ_{1s} , es posible extraer los valores aceptables para las longitudes de dispersión de ondas s . En cuanto a las fórmulas DGBT (Figura 3) son para $a_0^{1/2}$ $[0.192875, 0.203125] \pm 0.000625$; mientras que para $a_0^{3/2}$

$[-0.1467, -0.1259] \pm 0.0006$ aproximadamente. Por otro lado, los valores obtenidos considerando corrección de primer orden (ver Figura 5) son $a_0^{1/2}$ $[0.194125, 0.2045] \pm 0.000625$; y para $a_0^{3/2}$ $[-0.14675, -0.12615] \pm 0.00075$. Finalmente, tomando el segundo término de la serie de Dayson (Figura 6) se obtuvo $a_0^{1/2}$ $[0.1944, 0.2048] \pm 0.0006$; y $a_0^{3/2}$ $[-0.14675, -0.12575] \pm 0.00075$, todos los valores en unidades de $1/m_{\pi^-}$. Se puede apreciar un corrimiento a la derecha de las regiones calculadas con correcciones respecto a la región encontrada para las fórmulas DGBT. En la (Figura 6), se muestra a la misma escala, el efecto de las correcciones obtenidas.

En conclusión, no es posible dar un valor definitivo para las longitudes de dispersión de ondas s en la interacción pión-nucleón. Esto se debe a la complejidad del problema, y las aproximaciones que se aplican. Además, al comparar los resultados obtenidos aquí con los diferentes trabajos realizados y publicados por otros autores, estos valores varían considerablemente. Sin embargo para este trabajo los valores de las longitudes de dispersión de ondas s , pierden relevancia en cuanto a que la finalidad es encontrar una solución simultánea al sistema de ecuaciones para diferentes estados ligados.

Para concluir si los resultados obtenidos para $a_0^{1/2}$ y $a_0^{3/2}$ son aceptables o no es necesario realizar los cálculos para otros estados ligados; como el deuterio piónico $D\pi$, o el hidrógeno kaónico Hk con la finalidad de buscar región de convergencia completa simultánea, que involucre todos los estados y obtener así un resultado más preciso. Dicho trabajo queda como una extensión a este, ya que aquí se desarrolló solo el estado $H\pi$. Por ahora encontramos que dicha región existe para el átomo $H\pi$, luego el método se da correcto hasta este punto.

REFERENCIAS

- [1] J. Gasser, V.E. Lyubovitskij and A. Rusetsky, Phys.Rept. 456, 167, (2009).
- [2] A. N. Ivanov, M. Faber, J. Maron, N. I. Troitskaya. Energy level displacement of the excited nl state of pionic hydrogen. Eur.Phys.J.A. 19, 13 (2014).
- [3] P. A. M. Dirac, The Principles of Quantum Mechanics, (Ediciones Ariel Esplugues de Llobregat, Barcelona 1967), pp. 148-164.
- [4] Claude Itzicson and Jean-Bernard Zuber, Quantum Field Theory, (MacGraw-Hill, 1980), pp. 32-126.
- [5] J. Gasser, V.E. Lyubovitskij and A. Rusetsky, Ann.Rev.Nucl.Part.Sci. 59, 169 (2009).
- [6] S.S. Schweber, An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory, (Row, Peterson and co. Evanston III, Elmsford, New York, 1961), pp.330-338.
- [7] N. Zettili, Quantum Mechanics, Concepts and applications, (Jacksonville State University 2001), pp. 549-554.
- [8] H.J. Weber, G.B. Arfken, Essential mathematical methods for physicists (2003), pp. 86-95, 589-637.
- [9] A. N. Ivanov, M. Faber, A. Hirtl, J. Marton, N. I. Troitskaya, Eur.Phys.J.A. 18, 653 (2003).

- [10] J. Alonso Mendoza S, A. Delgado Solano, Bistua: Revista de la Facultad de Ciencias Básicas. 12, 83 (2014).
- [11] M. Abramowitz and I. E. Stegun, Handbook of mathematical functions, with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables, (U.S. Department of Commerce, National Bureau of Standards, Applied Mathematics Series 55, 1972), pp. 376, 486.
- [12] K.A. Olive *et al*, Chin. Phys. C, 38, 090001 (2014).
- [13] T.E.O. Ericson, B. Loiseau and S. Wycecha, Int.J.Mod.Phys.A. 20, 1650, (2004).
- [14] A. Delgado Solano, J.A. Mendoza Suarez, Bistua Revista de la Facultad de Ciencias Basicas. 11, 55 (2013).
- [15] S. Deser, M. L. Goldberger, K. Baumann, W. Thirring, Phys. Rev. 96, 774 (1954).

VISCOSIDAD MAGNÉTICA: DETERMINACIÓN DE LA RESISTIVIDAD ELÉCTRICA

MAGNETIC VISCOSITY: DETERMINATION OF ELECTRICAL RESISTIVITY

C. CASIMIRO-CARRAZANA, B. RODRÍGUEZ-SAENZ Y G. ROJAS-LORENZO[†]

Facultad de Ciencias y Tecnología Nucleares, InSTEC, Universidad de La Habana, Cuba; german@instec.cu[†]

[†] autor para la correspondencia

Recibido 20/10/2017; Aceptado 16/11/2017

Se propone una práctica de laboratorio para la asignatura de Electromagnetismo, que permite determinar la resistividad eléctrica del cobre, sobre la base del fenómeno de inducción electromagnética. Para ello se utiliza un modelo físico que describe el paso de un imán de neodimio a través de un tubo cilíndrico de cobre vertical, en el cual se representa a la fuerza ponderomotriz -magnética- que actúa sobre el imán como una fuerza viscosa. El modelo fue implementado numéricamente y el proceso simulado computacionalmente. En el desarrollo de la práctica se necesita realizar mediciones directas de varias magnitudes físicas como longitud, espesor, masa, tiempo y módulo del campo magnético.

A practical activity at laboratory associated to the course of Electromagnetism is proposed in order to determine electrical resistivity of copper, taking into account the electromagnetic induction phenomena. For this purpose, it was applied a physical model describing the movement of a neodymium magnet through a vertical cylindrical pipe made of copper, considering the magnetic force acting on the magnet as a viscosity force. The model was numerically implemented and several simulations of the process were carried out. Direct measurements of several physical quantities such as length, thickness, mass, time and modulus of magnetic field, were required during the activity.

PACS: Electromagnetic induction, 91.25.Qi; Coils 84.32.Hh; Diamagnetism in metals, 75.20.En; Laboratory experiment, 01.50.Pa; Physics education, 01.40.-d

I. INTRODUCCIÓN

Cuando un cuerpo, bajo la acción de la fuerza de gravedad, atraviesa un fluido viscoso en régimen laminar (valores bajos del número de Reynolds), podría, sobre la base de ciertas condiciones, comenzar a moverse con velocidad constante. Para ello el fluido debe tener un coeficiente de viscosidad lo suficientemente grande, que provoque que la fuerza de fricción que actúa sobre el cuerpo compense a la fuerza de gravedad. Si se cumplen estas condiciones, el cuerpo realizará un movimiento rectilíneo uniforme (MRU).

Un fenómeno que a primera vista parece tener poco, o casi nada, en común con el movimiento de un cuerpo a través de una sustancia viscosa, se manifiesta cuando dejamos caer un superimán a través de un tubo cilíndrico vertical, hecho de una sustancia diamagnética conductora (cobre). Experimentalmente, y de acuerdo al comportamiento de las sustancias diamagnéticas, se ha determinado que el imán no toca las paredes del tubo, y se establece un MRU a los pocos instantes de haber comenzado el movimiento [1-4].

Cuando el imán atraviesa el tubo de cobre, en este último se produce una corriente eléctrica bajo la acción de una *fem* inducida. La corriente se establece siguiendo una trayectoria cerrada a lo largo de la sección transversal del tubo. La circulación de la corriente por el medio diamagnético conductor interactúa con el imán y se manifiestan fuerzas ponderomotoras que se oponen a su movimiento. Estas fuerzas, sobre el imán, actúan en sentido contrario a la fuerza de gravedad y aumentan proporcionalmente con la velocidad del mismo. En estas condiciones el cuerpo

magnético realizará un movimiento desacelerado hasta que la fuerza resultante sobre él se anule, y a partir de ese momento su velocidad será constante (MRU).

El modelo propuesto en la literatura, para estudiar este fenómeno, considera al imán como una espira circular con corriente, que genera un momento dipolar magnético $\vec{m}$. Dicho momento $\vec{m}$ es estimado a partir de un ajuste realizado a mediciones experimentales del campo magnético del imán a lo largo de su eje de simetría, en función de la distancia [1,2].

El objetivo del trabajo es diseñar una práctica de laboratorio que, sobre la base del experimento descrito, permita la determinación de la resistividad del material conductor y diamagnético. Para ello se utiliza el modelo que considera al imán como una espira circular con corriente, pero en lugar de estimar el momento $\vec{m}$ se estima la corriente I_0 . A partir de esta consideración se realizaron los desarrollos matemáticos pertinentes en busca de su solución analítica y numérica. Es importante destacar que este no es, necesariamente, el mejor método para medir la resistividad. La idea central del trabajo consiste en explorar el fenómeno que nos ocupa para hallarla.

II. MATERIALES Y MÉTODOS

La fuerza ponderomotriz que actúa sobre un superimán, que cae bajo la fuerza de gravedad a través de un tubo largo de cobre, tiene un efecto muy parecido al producido por la resistencia fluido-dinámica. Esta fuerza $\vec{F}_f$ es proporcional a la velocidad y se puede expresar como,

$$\vec{F}_f = -K_f \vec{v}, \quad (1)$$

donde el signo negativo indica que la fuerza se manifiesta en sentido opuesto al movimiento, y la constante K_f se denomina rozamiento aerodinámico.

Mediante este razonamiento se puede, como primera aproximación, asumir que sobre el imán actúa una fuerza como la descrita en la ecuación (1). La misma es provocada por la interacción del campo magnético del imán con la corriente inducida a través de la sustancia diamagnética conductora. La constante $K = K_m$ asociada a ella la denominaremos rozamiento magnético por analogía. Desde este punto de vista sobre el imán actúan dos fuerzas de fricción, la de rozamiento aerodinámico y la de rozamiento magnético, las que contribuyen a una fuerza de sustentación neta,

$$\vec{F} = -(K_f + K_m) \vec{v}. \quad (2)$$

Sin embargo, el experimento demuestra que existe una diferencia muy marcada en el tiempo que necesita el imán y cualquier otro objeto no magnético, de masas y características geométricas similares, para atravesar un tubo de cobre vertical largo. Por ello en el frenado del imán el papel decisivo lo juega el rozamiento magnético y no el aerodinámico. Para este caso, por simplicidad, se asumirá que el efecto de la fuerza de resistencia fluido-dinámica es despreciable frente al provocado por el rozamiento magnético. Su movimiento estará regido en lo fundamental por la acción de una fuerza $\vec{F}_m$ de rozamiento magnético y la acción de la fuerza de gravedad $\vec{F}_g$. Por lo tanto, de la segunda ley de Newton aplicada sobre el imán, se tiene que:

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{F}_g + \vec{F}_m, \quad (3)$$

que conduce a la siguiente expresión para la aceleración del cuerpo,

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{g} - \frac{K}{m} \vec{v}. \quad (4)$$

En la ecuación (4) se presenta a la constante K_m como K , a la masa del imán como m y a la aceleración de la gravedad, en la superficie de la tierra, como g . Considerándose en la misma que los vectores son paralelos y tienen el mismo sentido, esta se puede escribir como,

$$\frac{dv}{dt} = g - \frac{K}{m} v. \quad (5)$$

La solución de la ecuación diferencial (5) es

$$v(t) = \frac{mg}{K} \left[1 - e^{-\frac{K}{m}t} \right], \quad (6)$$

donde se observa que para tiempos muy grandes el término exponencial de la ecuación desaparece y la velocidad tiende a ser constante. No obstante, el experimento muestra que para tiempos relativamente pequeños, del orden de las décimas de segundo, esta aproximación es buena. Por ello, el tiempo que

tarda el imán en recorrer la tubería va a estar determinado en lo fundamental por la velocidad constante que alcanza en su recorrido vertical [1,2].

A partir de estas consideraciones se puede determinar la velocidad del imán, en su movimiento, como,

$$v(t) = \frac{mg}{K} \approx \frac{L}{\Delta t}, \quad (7)$$

siendo L la longitud de la tubería de cobre y Δt el tiempo del recorrido del imán a través de la misma.

El primer paso a seguir, para cumplir el objetivo propuesto, es encontrar una expresión analítica que permita determinar el coeficiente K . Para ello se utiliza la analogía que se establece entre el campo magnético del imán y el de una cinta con corriente, tal como se plantea en la literatura [1,2]. Como el imán utilizado tiene simetría axial en su geometría (cilindro de radio r y altura h), la cinta conductora se toma como una espira circular de radio exterior r por la que circula la corriente I_0 . Además se considera que el tubo de cobre es infinito. Esta asunción se realiza sobre la base de que la longitud del tubo L es mucho mayor que la altura del imán ($h \ll L$), y permite despreciar en el modelo los llamados efectos de borde.

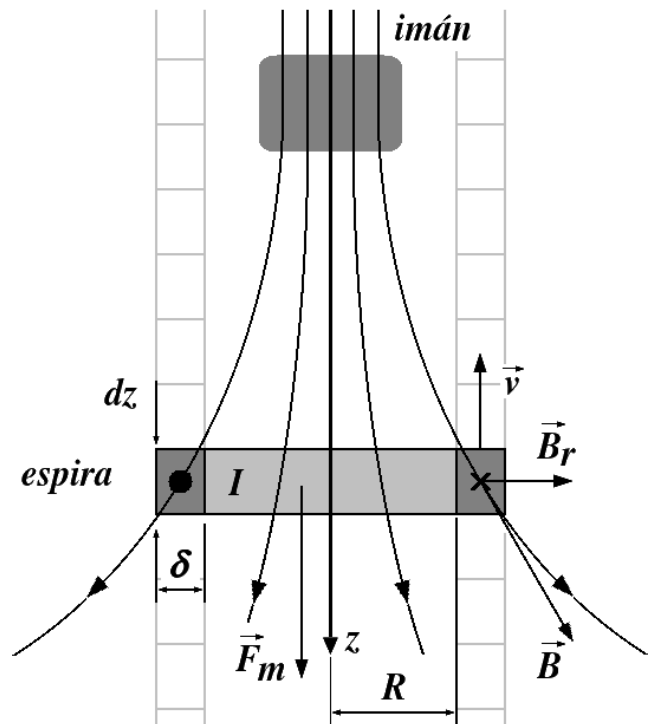


Figura 1. Representación de una sección del tubo conductor diamagnético de altura dz , radio interior R y espesor δ , por la que circula una corriente I en presencia de un imán.

En el modelo, para representar el tubo conductor y diamagnético, este se divide a lo largo de su altura, en secciones dz muy pequeñas, de espesor δ , que tienen forma de anillo (espira circular).

Para el estudio de la corriente que se genera en una de estas espiras, como resultado de la inducción provocada por el

movimiento del imán (vea la Figura 1), se coloca el sistema de referencia en el cuerpo magnético, y por lo tanto, es el anillo el que se mueve. En el esquema se representa con R el radio interior del anillo, con $\vec{B}_r$ la componente radial del campo de inducción magnética $\vec{B}$ generado por el imán en los puntos de la espira, y con I la corriente que produce la *fem* inducida por el movimiento relativo imán-espira.

Para determinar el valor de la *fem* se hará uso de la siguiente expresión:

$$\varepsilon = \oint (\vec{v} \times \vec{B}) \cdot d\vec{l} = 2\pi R v B_r. \quad (8)$$

La corriente I que se induce en el anillo, producto de esta *fem*, se determina a partir de la ley integral de Ohm, como la razón entre la fuerza electromotriz ε y la resistencia R_Ω de una espira circular con sección rectangular. Para calcular el valor de la resistencia del anillo se utiliza la ley de Poillet y el tratamiento de resistencias conectadas en paralelo. De ello se obtiene,

$$R_\Omega = \frac{2\pi\rho}{dz \ln(1 + \delta/R)}, \quad (9)$$

donde ρ es la resistividad eléctrica del material del cual esta hecho el tubo diamagnético y conductor. Por lo tanto, la corriente I , inducida en el anillo, adquiere la forma,

$$I = \frac{RvB_r}{\rho} \ln(1 + \delta/R) dz, \quad (10)$$

La fuerza que actúa sobre el imán como consecuencia de la interacción de su campo magnético con la corriente inducida en el anillo se puede determinar según la ecuación,

$$\vec{F}_m = \oint_I d\vec{l} \times \vec{B} = 2\pi R I B_r \hat{k}. \quad (11)$$

El valor del módulo de la componente radial del campo magnético B_r del imán, se obtiene al aplicar la Ley de Biot-Savart al modelo que lo considera como una espira circular con corriente I_0 (ver deducción en el anexo),

$$B_r = \frac{\mu_0 I_0}{2\pi} r z \int_0^\pi \frac{\cos(u) du}{[R^2 + r^2 + z^2 + 2rR \cos(u)]^{3/2}}. \quad (12)$$

En la ecuación (12) el término z representa la distancia que hay desde el centro del anillo por el que circula la corriente I (sección del tubo) hasta el centro de la espira circular por la que pasa la corriente I_0 (imán). La componente radial del campo que genera la corriente I_0 depende de las variables r, R y z .

Al considerar al tubo diamagnético conductor como la superposición de muchos anillos de radio R , que se encuentran a diferentes distancias z , del centro de la espira que representa al imán, podemos determinar la fuerza que

ejerce este último sobre el tubo. Para ello se calcula la suma de las fuerzas que ejerce el material magnético sobre cada uno de los anillos que componen al tubo diamagnético conductor. El módulo de la fuerza que actúa sobre cada anillo, en la dirección $\hat{k}$, se considera como un pequeño aporte y está dado por la expresión,

$$dF_m = \alpha v \beta(r, R, z) dz, \quad (13)$$

donde el término,

$$\alpha = \frac{(\mu_0 I_0)^2}{2\pi} \frac{\ln(1 + \delta/R)}{\rho}, \quad (14)$$

y el término,

$$\beta = (Rr z)^2 \left\{ \int_0^\pi \frac{\cos(u) du}{[R^2 + r^2 + z^2 + 2rR \cos(u)]^{3/2}} \right\}^2. \quad (15)$$

Como el radio del tubo de cobre R es estrictamente mayor que el radio de la espira con corriente r , en esta última ecuación el denominador es diferente de cero para cualquier valor de u y de z .

El módulo de la fuerza neta que ejerce el imán sobre el tubo (y por tercera Ley de Newton, la que el tubo ejerce sobre el imán) se obtiene al integrar por toda la longitud del tubo (infinito),

$$F_m = \alpha \gamma(r, R) v, \quad (16)$$

donde,

$$\gamma(r, R) = \int_{-\infty}^{\infty} \beta(r, R, z) dz. \quad (17)$$

En la ecuación (17) se aprecia que $\gamma(r, R)$ es una constante que depende únicamente de los radios del imán r y del tubo R . En la misma, en función de la variable z , se obtiene en los casos límites $-\infty$ y $+\infty$ una dependencia del tipo z^{-4} . Numéricamente se comprobó la convergencia de la integral (17), y se obtuvo el valor de la constante.

Con los desarrollos obtenidos en las ecuaciones (7), (14) y (16), al hacer las sustituciones pertinentes, para el caso en que la fuerza magnética compense a la fuerza de gravedad ($F_m = F_g$), se llega a la ecuación,

$$\rho = I_0^2 \frac{\ln(1 + \delta/R)}{mg} \frac{L}{\Delta t} \gamma(r, R). \quad (18)$$

Note que a partir de la ecuación (16) se puede obtener la constante de fricción como $K = \alpha \gamma(r, R)$, mientras que de la relación (7) se puede expresar a la misma como $K = mg \Delta t / L$.

III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

El resultado expresado en la ecuación (18), abre la posibilidad de crear una práctica de laboratorio, para determinar la resistividad del material del que está hecho el tubo diamagnético, conductor. Para ello se necesita medir experimentalmente los valores de las características del tubo (R , δ , L), del imán (r , m), el tiempo Δt , y el campo magnético del imán, a lo largo de su eje de simetría, en función de la distancia a este. También se requiere estimar, con un ajuste, la corriente I_0 y calcular, con un programa numérico, el valor del coeficiente $\gamma(r, R)$.

Se montó un pequeño dispositivo experimental para medir los valores del campo magnético, en el eje de simetría del imán, a diferentes distancias del mismo. Para ello se utilizó un magnetómetro de efecto Hall (Figura 2) y un soporte milimetrado que sostiene, mediante un brazo no magnético (madera) al elemento magnético.

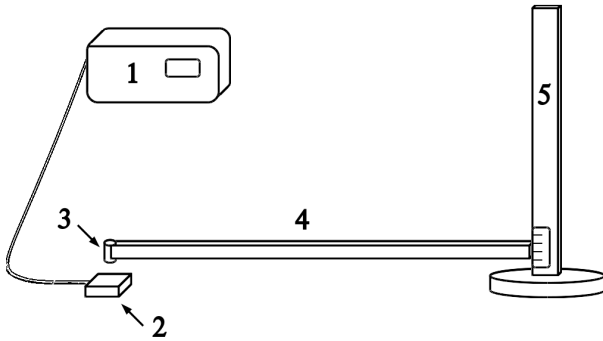


Figura 2. Dispositivo experimental para determinar el campo magnético del imán a lo largo de su eje de simetría, en función de la distancia. Magnetómetro de efecto Hall (1), elemento Hall (2), imán (3), brazo de madera (4), soporte de medición (5).

En la Figura, a la derecha, detrás, está el magnetómetro de efecto Hall y delante se encuentra un soporte vertical que tiene un sistema de nonios para la medición de la distancia. Acoplado al soporte hay un brazo de madera horizontal, en cuyo extremo izquierdo se coloca el imán. A la izquierda y bajo el extremo del brazo de madera, se encuentra la pastilla Hall.

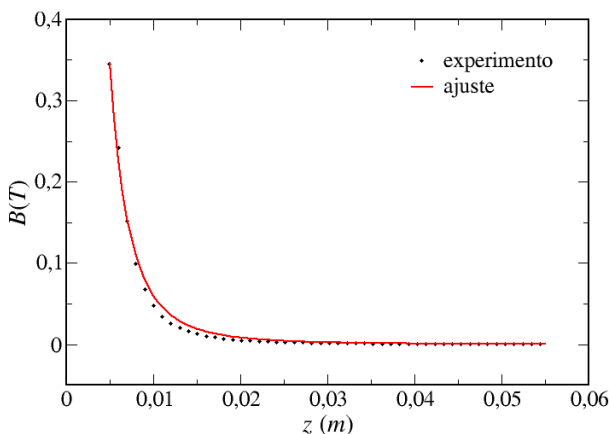


Figura 3. Ajuste de los datos experimentales a la función descrita por la ecuación (19).

Los valores de campo magnético en función de la distancia al imán se ajustaron a través de la ecuación (19), que describe el campo magnético de una espira circular con corriente, en el eje de simetría de la misma a una distancia z de su centro. Como parámetro de ajuste se utilizó la corriente I_0 . El valor de r se tomó de las mediciones directas realizadas sobre el imán.

$$B(z) = \frac{\mu_0 I_0}{2} \frac{r^2}{(r^2 + z^2)^{3/2}} \quad (19)$$

En el ajuste se obtuvo un coeficiente de correlación, entre los datos experimentales y la función de prueba, de 0,997. El valor de la corriente I_0 fue de 12126,1 A. En la Figura 3 se presentan los datos experimentales con círculos negros, y el resultado del ajuste con una línea continua en rojo.

El último paso es la medición de Δt . La misma se realizó con la ayuda de un dispositivo, como el que se muestra en la Figura 4, para medir tiempos en experimentos de caída libre. Este dispositivo consta de un electroimán que permite sostener al imán, justo sobre el borde superior del tubo de cobre. Al liberar el imán, éste pasa por dos sensores. El primero se coloca justo en el extremo superior del tubo (registra el instante en que se inicia el proceso) y el otro se coloca justo en el extremo inferior del mismo (registra el instante en que finaliza el proceso). El equipo reporta el tiempo que tarda el imán en recorrer el tubo de cobre.

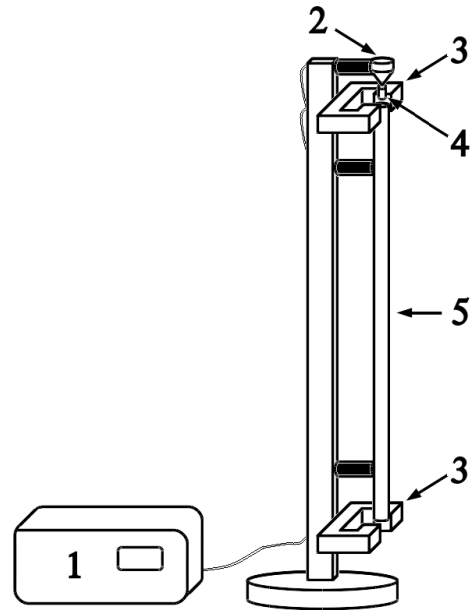


Figura 4. Dispositivo experimental modificado para medir el tiempo que demora el imán en atravesar el tubo de cobre. Equipo para registro del tiempo (1) y control del electroimán (2) y de los sensores (3), imán (4), tubo de cobre (5).

Las mediciones del tiempo de tránsito del imán por el tubo de cobre se realizaron 100 veces. El resultado arrojó un valor de $(4,280 \pm 0,001)$ s.

La masa del elemento de neodimio se midió en una balanza analítica. Los radios y alturas del tubo de cobre y del imán, así como el espesor del primero, se midieron con ayuda de

un pie de rey. En la Tabla 1 se presentan los resultados de las mediciones directas realizadas

Tabla 1. Mediciones directas de las propiedades del tubo y el imán.

Magnitud	Valor	Incertidumbre
R	8,00 mm	0,01 mm
L	37,6 cm	0,1 cm
δ	1,00 mm	0,01 mm
r	3,00 mm	0,01 mm
m	1,17 g	0,01 g

Se resuelve numéricamente la integral (17), para los valores de r y R reportados en la Tabla 1. Esto arroja el valor para $\gamma(r, R)$ de $1,28 \times 10^{-16}$ kg Ω m/A² s.

La resistividad eléctrica del cobre, determinada a través de la relación (18), toma el valor de $1,705 \times 10^{-8}$ Ω m. En la literatura se reportan diversos valores que dependen de la pureza del cobre, de la temperatura, y de otros factores como tratamientos térmicos que se les aplica, etc. A la temperatura de 293 K, se reportan valores que pueden variar entre $1,680 \times 10^{-8}$ Ω m y $1,780 \times 10^{-8}$ Ω m [4-6]. La desviación del valor obtenido, respecto a los límites encontrados en la literatura es menor que el 4,0 por ciento. Para el cobre tratado térmicamente se reporta el valor de $1,720 \times 10^{-8}$ Ω m, [5] lo que refleja, respecto a nuestro cálculo, una desviación de 1,1 por ciento.

En la práctica de conductividad eléctrica en sólidos, donde el valor obtenido para la resistividad del cobre es de $1,749 \times 10^{-8}$ Ω m, se utiliza un alambre y su resistividad se determina a través de la Ley de Poillet. En este caso, nuevamente, la desviación del valor obtenido, respecto a los límites encontrados en la literatura es menor que el 4,0 por ciento.

La diferencia de los resultados entre la práctica que proponemos y la de conductividad eléctrica en sólidos, podría deberse a que en un caso se trabaja con un tubo de cobre tratado térmicamente, y en el otro con un alambre conductor filiforme de cobre.

En trabajos futuros se aplicará el modelo al caso de un tubo de aluminio. Este material conductor es paramagnético, sin embargo se ha comprobado que las interacciones de este con el tubo son tan débiles que el mismo no se pega a sus paredes.

IV. CONCLUSIONES

El modelo utilizado para representar el imán (una espira por la que circula una corriente I_0 , lo suficientemente grande para generar el campo magnético del superimán), ha permitido obtener valores de la resistividad del cobre bastante precisos. Se pudo reproducir en gran medida el comportamiento real del imán, lo cual se verifica en los resultados obtenidos.

Debido a las condiciones en que se llevó a cabo el experimento, es posible, montar una práctica de laboratorio, ya que se necesita un magnetómetro por efecto Hall, un tubo de material diamagnético conductor, una instalación que permita medir intervalos de tiempo en caída libre, y un superimán.

El valor obtenido para la resistividad está en muy buena concordancia con el valor reportado experimentalmente, con una desviación de 1,1 por ciento.

En esta propuesta, mediante modelos numéricos, el estudiante será capaz de interactuar con el fenómeno de interés, extraer conclusiones sobre el comportamiento del superimán, así como obtener una aproximación confiable sobre la resistividad del material del tubo conductor diamagnético.

Se ha explicado de manera satisfactoria, el proceso de interacción entre un superimán, y un tubo vertical de material diamagnético conductor, en movimiento a través del mismo.

La práctica de laboratorio propuesta integra conocimientos de mecánica, electromagnetismo, análisis matemático y métodos numéricos.

V. AGRADECIMIENTOS

Los autores expresan su agradecimiento al Dr. Alfo José Batista Leyva por todo el aporte que realizó a través de constantes y fructíferas discusiones. Igualmente, se agradece el tiempo y recursos de los laboratorios de Mecánica, Molecular y Electrónica que ofrecieron los profesores Lic. Lázaro Hassiel Negrín Yuvero, Lic. Nadina Tomás Cobas y MsC. Doris Rivero Ramírez.

VI. ANEXO

La obtención de la ecuación (12) se apoya en los elementos presentes en la Figura 5. En la misma tenemos una espira circular de radio r , por la que pasa una corriente I_0 . El origen de coordenadas se coloca en el centro de la espira, de manera que esta se encuentra en el plano $z = 0$. El vector $\vec{r}_1$, cuyo módulo es igual a r , indica la posición de un elemento de corriente en la espira, el vector $\vec{r}_2$ señala el punto donde se desea determinar el vector de inducción magnética, y el vector $\vec{r}_2 - \vec{r}_1$ es tal que su módulo representa la distancia que hay desde el elemento de corriente hasta el punto de observación.

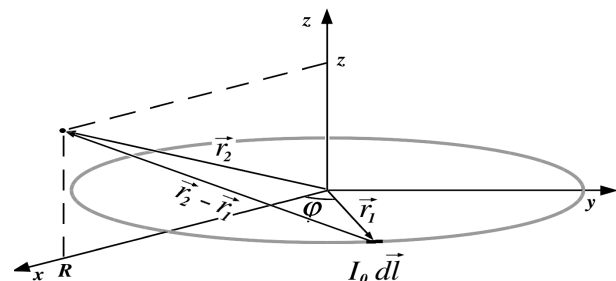


Figura 5. Elementos presentes en la determinación del vector de inducción magnética por medio de la Ley de Biot-Savart.

El vector $\vec{r}_1$, en coordenadas cartesianas, se expresa como

$$\vec{r}_1 = x \hat{i} + y \hat{j}.$$

Este vector está contenido en el plano $z = 0$ y señala a los puntos de una circunferencia de radio r . Al expresar las

variables x y y en función de las variables r y φ , el mismo adopta la forma, $\vec{r}_1 = r \cos \varphi \hat{i} + r \sin \varphi \hat{j}$.

El vector $\vec{r}_2$, se encuentra contenido, por conveniencia, en el plano $y = 0$, por lo que,

$$\vec{r}_2 = R \hat{i} + z \hat{k}.$$

Con estos resultados se obtiene,

$$\vec{r}_2 - \vec{r}_1 = (R - r \cos \varphi) \hat{i} - r \sin \varphi \hat{j} + z \hat{k},$$

cuyo módulo es,

$$|\vec{r}_2 - \vec{r}_1| = \sqrt{(R - r \cos \varphi)^2 + (r \sin \varphi)^2 + z^2},$$

que se transforma en

$$|\vec{r}_2 - \vec{r}_1| = \sqrt{R^2 + r^2 + z^2 - 2Rr \cos \varphi}.$$

En el sistema MKS la Ley de Biot-Savart se plantea como,

$$d\vec{B}(\vec{r}_2) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{I_0 d\vec{l} \times (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|^3},$$

donde, $d\vec{l} = dx \hat{i} + dy \hat{j}$, que en función de las variables r y φ adopta la forma,

$$d\vec{l} = -r \sin \varphi d\varphi \hat{i} + r \cos \varphi d\varphi \hat{j}.$$

Entonces, al resolver el producto vectorial en la Ley de Biot-Savart, las contribuciones que realiza el elemento de corriente a las componentes del campo, en el punto que señala $\vec{r}_2$ son,

$$dB_x = \frac{\mu_0 I_0}{4\pi} r z \frac{\cos \varphi d\varphi}{[R^2 + r^2 + z^2 - 2Rr \cos \varphi]^{3/2}},$$

$$dB_y = \frac{\mu_0 I_0}{4\pi} r z \frac{\sin \varphi d\varphi}{[R^2 + r^2 + z^2 - 2Rr \cos \varphi]^{3/2}},$$

$$dB_z = \frac{\mu_0 I_0}{4\pi} r \frac{(r - R \cos \varphi) d\varphi}{[R^2 + r^2 + z^2 - 2Rr \cos \varphi]^{3/2}}.$$

El punto de observación se seleccionó en el plano $y = 0$ porque en el mismo la dirección y sentido del versor $\hat{i}$ coinciden con las del versor $\hat{r}$, el cual indica la dirección

radial en coordenadas cilíndricas. Para puntos fuera de este plano el resultado es el mismo, pues siempre podremos seleccionar el sistema de coordenadas de forma que el punto de observación esté contenido en el plano $y = 0$.

Al integrar los aportes de todos los elementos de corrientes que conforman la espira, la componente radial del campo resultante queda como,

$$B_r = \frac{\mu_0 I_0}{4\pi} r z \int_0^{2\pi} \frac{\cos \varphi d\varphi}{[R^2 + r^2 + z^2 - 2Rr \cos \varphi]^{3/2}}.$$

Con el cambio de variables $u = \varphi - \pi$ se obtiene,

$$B_r = \frac{\mu_0 I_0}{4\pi} r z \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\cos(u) du}{[R^2 + r^2 + z^2 + 2Rr \cos(u)]^{3/2}},$$

la que es simétrica en el intervalo de integración, y por lo tanto se puede reescribir como,

$$B_r = \frac{\mu_0 I_0}{2\pi} r z \int_0^{\pi} \frac{\cos(u) du}{[R^2 + r^2 + z^2 + 2Rr \cos(u)]^{3/2}}.$$

REFERENCIAS

- [1] G. Donoso, C. L. Ladera and P. Martín, Am. J. Phys. 79, 193 (2011).
- [2] G. Donoso, C. L. Ladera and P. Martín, Eur. J. Phys. 30, 855 (2009).
- [3] K. Weise. "Advanced Modeling in Lorentz Force Eddy Current Testing". Tesis de doctorado, Universidad Técnica de Ilmenau, 2016.
- [4] R. P. Uhlig, M. Zec, H. Brauer and A. Thess, J. Nondestruct. Eval. 31, 357 (2012).
- [5] Bureau of standards, Copper wire tables. (Washington Government Printing Office, 1914)
- [6] W. Benenson, J.W. Harris, H. Stocker and H. Lutz, Handbook of Physics Fourth Edition 2000 (Springer-Verlag, New York, 2002)

REDFIELD DYNAMICS OF A QUANTUM SPHERICAL SPIN

DINÁMICA DE REDFIELD DEL SPIN CUÁNTICO ESFÉRICO

M. T. PÉREZ-MALDONADO^{a†}, G. MONSIVAIS^b, R. MULET^c

a) Group of Theory of Nano-structures, Department of Theoretical Physics. Physics Faculty, University of Havana; mtperez@fisica.uh.cu[†]

b) Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México

c) Group of Complex Systems and Statistical Physics, Department of Theoretical Physics. Physics Faculty, University of Havana

[†] corresponding author

Recibido 21/7/2017; Aceptado 20/11/2017

The temporal evolution of a quantum spherical spin in contact with a thermal bath is studied by solving the exact Redfield equation, in order to evaluate the effect of the frequently used Lindblad approximation. This simple model can be used as a starting point for the study of more complex open quantum systems. Significant discrepancies are observed for short times. In the equilibrium state both models give identical results, as expected.

Mediante la solución numérica de la ecuación exacta de Redfield, se estudia cuantitativamente el efecto de la aproximación de Lindblad sobre la dinámica temporal de un spin cuántico esférico en contacto con un baño térmico. Se utiliza este caso simple como punto de partida para el análisis de sistemas cuánticos abiertos más complejos. Se evidencian discrepancias notables para tiempos cortos, así como la coincidencia de los resultados para el estado de equilibrio.

PACS: Quantum statistical mechanics 05.30.-d; Quantized spin models 75.10.Jm; Lattice theory and statistics 05.50.+q

I. INTRODUCTION

It is well known that real quantum systems are not truly isolated from the environment. This implies that the comprehension of the properties of real quantum systems is connected with the proper understanding of the effects of dissipation and decoherence in quantum mechanics. This is a subject that goes beyond academic interest in the foundation of quantum mechanics and it is relevant to understand experimental works on qubits and quantum information processing.

Any theory for a quantum system that exchanges energy with its environment should lead to a master equation which satisfies three basic conditions: preserves the Hermiticity of the density matrix, preserves the trace of the density matrix and the probability of all possible states is positive [1, 2]. There are two main methods to find such master equations. The first one, Lindblad's approach, is phenomenological, and basically tries to build such master equation satisfying the conditions above. In the second approach, Bloch-Redfield's, one takes the evolution of a system and its environment and traces over the environment degrees-of-freedom. Unfortunately, in most cases one has to treat the system-environment interaction perturbatively.

In this work we compare the performance of both methods in a simple model. We first show, following a standard approach, how the Lindblad master equation can be understood as a special case of the Redfield master equation. We also make clear how the approximation made in going from the later to the first changes the behaviour of the model, specially on short time scales.

II. THE MODEL

The spherical spin model, in its classical form, was introduced by Berlin and Kac [3] as an alternative to the Onsager solution for the 2D Ising model. The classical spherical spin model is formally identical to the Ising model, with a global constraint to ensure the analytical result for the partition function. This model has been extended to different quantum versions [4, 5] in order to reproduce the right low-temperature behaviour. Both models are remarkable for having exact solutions in many settings and a non mean-field type critical behaviour.

In absence of magnetic field, the Hamiltonian can be written as

$$\hat{H} = \sum_n \left(\frac{g}{2} \hat{p}_n^2 + \frac{\mu(t)}{2} \hat{s}_n^2 - \sum_{j=1}^d J \hat{s}_n \hat{s}_{n+e_j} \right), \quad (1)$$

where the Lagrange multiplier $\mu(t)$ is chosen to satisfy the constraint

$$\left\langle \sum_n \hat{s}_n^2 \right\rangle = N. \quad (2)$$

The simplest possible approximation to deal with this problem, is the mean field one. It translates into the solution of the following one spin problem:

$$\hat{H} = \frac{g}{2} \hat{p}^2 + \frac{\mu(t)}{2} \hat{s}^2, \quad (3)$$

$$\langle \hat{s}^2 \rangle = 1. \quad (4)$$

Operators satisfy the commutation relation

$$[\hat{s}, \hat{p}] = i\hbar. \quad (5)$$

The Hamiltonian in (3) is equivalent to

$$\hat{H} = \hbar\omega(t)\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right), \quad (6)$$

where creation and annihilation operators are introduced in the usual way:

$$\hat{s} = \sqrt{\frac{\hbar g}{2\omega(t)}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}), \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar\omega(t)}{2g}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \quad (7)$$

and

$$\omega(t) = \sqrt{\mu(t)}g. \quad (8)$$

Notice that equation (6) can be understood as a quantum harmonic oscillator with variable frequency. This is a problem that have been largely studied in the past. Indeed it is an archetypical problem in quantum optics, see for example [6] and references therein but also the particular solution to similar problems described in [7]. Historically, it is worth to mention the study by [8] of a decaying Fabry-Pérot cavity. In short, the usual motivation to study this kind of hamiltonians in quantum optics comes from the interest in the understanding of the interactions of an oscillator with an environment, that may act as a time dependent damping of the frequency, or alternatively by the presence of varying external fields that may act as controlled modulators of this frequency.

However, the spherical constraint (4) in this model implies that

$$\omega(t) = \frac{\hbar g}{2} \left(\langle \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \rangle + \langle \hat{a} \hat{a} \rangle + 2 \langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle + 1 \right). \quad (9)$$

and defines a model that differentiate from the ones usually studied in quantum optics. In summary, our work could be understood, starting directly from equation (6) as the study of the interaction with the environment of a very particular case of a quantum Hamiltonian with variable frequency, as usually done in quantum optics. But, alternatively, it may be understood as a mean field approximation to the quantum spherical spin defined in (1) and (2).

III. OPEN QUANTUM SYSTEMS

The temporal evolution of the density matrix $\hat{P}$ of a quantum system is given by the Liouville-von Neumann equation:

$$\dot{\hat{P}} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{P}], \quad (10)$$

where $\hat{H}$ is the Hamiltonian of the system.

Let us consider an open quantum system S in contact with another quantum system B , called the environment. The Hamiltonian of the total system $S + B$ is

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_S + \hat{H}_B + \hat{H}_{SB}, \quad (11)$$

where $\hat{H}_{SB}$ is the interaction Hamiltonian between S and B . From now on, we will call S the reduced system.

In the interaction representation, the density matrix $\hat{\rho}$ of the reduced system satisfies the Redfield equation

$$\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \text{Tr}_B \left[\hat{H}_{SB}(t), \left[\hat{H}_{SB}(t'), \hat{\rho}(t') \otimes \hat{R}_0 \right] \right], \quad (12)$$

where the well known Born approximation has been used [1,2], i.e., the coupling between the reduced system and the environment is weak. Here $\hat{R}_0$ is the density matrix of the environment.

A commonly used approximation is the substitution of the upper integration limit in Eq. (12) for infinity. The result is known as Lindblad equation:

$$\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dt' \text{Tr}_B \left[\hat{H}_{SB}(t), \left[\hat{H}_{SB}(t'), \hat{\rho}(t') \otimes \hat{R}_0 \right] \right]. \quad (13)$$

This approximation is valid if the time scale over which the state of the reduced system varies substantially is large compared to the time scale over which the reservoir correlation functions decay appreciably [1]. If this condition does not hold, Eq. (13) is no longer valid and Eq. (12) must be used to describe the time evolution of the reduced system. For example, in photosynthetic complexes quantum coherence may play a fundamental role in the highly efficient transport of excitations, even in the presence of noise and high temperatures [9].

Equations (12) and (13) are difficult to solve, even for simple models. Instead, equations for the time evolution of some physical observables are solved [2]. The purpose of this work is to solve a set of equations derived from (12) in order to estimate the magnitude of the approximation in (13). We have chosen the quantum spherical spin model [4], whose Lindblad dynamics have been recently studied in [10].

IV. REDFIELD DYNAMICS

Following [2], in the limit of zero temperature equation (12) for a quantum harmonic oscillator of frequency $\omega(t)$ in an environment consistent of an infinite set of harmonic oscillators takes the form

$$\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = -i\Delta(t) [\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{\rho}] + \frac{\gamma(t)}{2} (2\hat{a}\hat{\rho}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \hat{a}\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{a}^\dagger \hat{a}), \quad (14)$$

where

$$\gamma(t) = 2 \text{Re} \{ \alpha(t) \}, \quad \Delta(t) = \text{Im} \{ \alpha(t) \} \quad (15)$$

and

$$\alpha(t) = \alpha_L + \alpha_R(t), \quad (16)$$

with,

$$\alpha_L = \int_0^\infty d\tau \int_0^\infty d\omega' \exp[-i(\omega' - \omega(\tau))\tau] g(\omega') |\kappa(\omega')|^2 \quad (17)$$

and,

$$\alpha_R(t) = - \int_t^\infty d\tau \int_0^\infty d\omega' \exp[-i(\omega' - \omega(\tau))\tau] g(\omega') |\kappa(\omega')|^2. \quad (18)$$

We have explicitly separated the Lindblad, α_L , and Redfield, α_R , contributions. We have also defined $\gamma_L = 2 \operatorname{Re}\{\alpha_L\}$, $\gamma_R(t) = 2 \operatorname{Re}\{\alpha_R(t)\}$, $\Delta_L = \operatorname{Im}\{\alpha_L\}$, $\Delta_R(t) = \operatorname{Im}\{\alpha_R(t)\}$.

In (17) and (18), $g(\omega)$ is the environment density of modes, and $\kappa(\omega)$ is the coupling constant from the interaction Hamiltonian $\hat{H}_{SB}$, which in the rotating wave approximation takes the form

$$\hat{H}_{SB} = \hbar \sum_j (\kappa_j^* \hat{a} \hat{b}_j^\dagger + \kappa_j \hat{a}^\dagger \hat{b}_j). \quad (19)$$

We have assumed $g(\omega) |\kappa(\omega)|^2$ linear in ω with a cutoff frequency ω_{max} :

$$g(\omega) |\kappa(\omega)|^2 = C\omega \theta(\omega_{max} - \omega), \quad (20)$$

where C is a constant (irrelevant after adimensionalization) and $\theta(x)$ is the Heaviside step function.

Due to the presence of $\omega(t)$ in the integrands of (17) and (18), this problem must be solved in self-consistent form, using Redfield equation (14) and the spherical constraint (4). Following [10], we have taken the constant value $\omega(t) = \omega_0$ in the evaluation of both integrals. This is equivalent to consider the spherical constraint coming from a second bath, whose relaxation time is much shorter than the thermal one. Anyway, in next section we present the results for another, non-trivial $\omega(t)$ dependence.

With the choice (20) and after some manipulation one can show that:

$$\gamma_L = 2\pi\omega_0, \quad \Delta_L = -\omega_{max} - \omega_0 \ln\left(\frac{\omega_{max}}{\omega_0} - 1\right) \quad (21)$$

$$\gamma_R(t) = -2\omega_0 [\pi - \operatorname{Si}((\omega_{max} - \omega_0)t) - \operatorname{Si}(\omega_0 t)] + \frac{4}{t} \sin\left(\frac{\omega_{max}t}{2}\right) \sin\left(\frac{(\omega_{max} - 2\omega_0)t}{2}\right) \quad (22)$$

$$\Delta_R(t) = \omega_0 [\operatorname{Ci}((\omega_{max} - \omega_0)t) + \operatorname{Ci}(\omega_0 t)] + \frac{2}{t} \sin\left(\frac{\omega_{max}t}{2}\right) \cos\left(\frac{(\omega_{max} - 2\omega_0)t}{2}\right), \quad (23)$$

where

$$\operatorname{Si}(z) = \int_0^z \frac{\sin t}{t} dt, \quad \operatorname{Ci}(z) = - \int_z^\infty \frac{\cos t}{t} dt. \quad (24)$$

V. RESULTS AND DISCUSSION

From (14) the following temporal evolution equations are obtained:

$$\frac{\partial \langle \hat{a} \rangle}{\partial t} = - \left[\frac{\gamma(t)}{2} + i(\omega(t) + \Delta(t)) \right] \langle \hat{a} \rangle, \quad \frac{\partial \langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle}{\partial t} = -\gamma(t) \langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle \quad (25)$$

and

$$\frac{\partial \langle \hat{a} \hat{a} \rangle}{\partial t} = -2 \left[\frac{\gamma(t)}{2} + i(\omega(t) + \Delta(t)) \right] \langle \hat{a} \hat{a} \rangle. \quad (26)$$

Numerical solutions of the system (25)-(26) are shown in Figure 1 for different values of $\Omega = \omega_{max}/\omega_0$ and $\Gamma = \hbar g/\gamma_L$. Frequency $\omega(t)$ (in units of $\hbar g/2$) and magnetization $m(t)$ are plotted as functions of time (in units of $1/\gamma_L$). The dashed line corresponds to Lindblad approximation, and the solid line to Redfield dynamics.

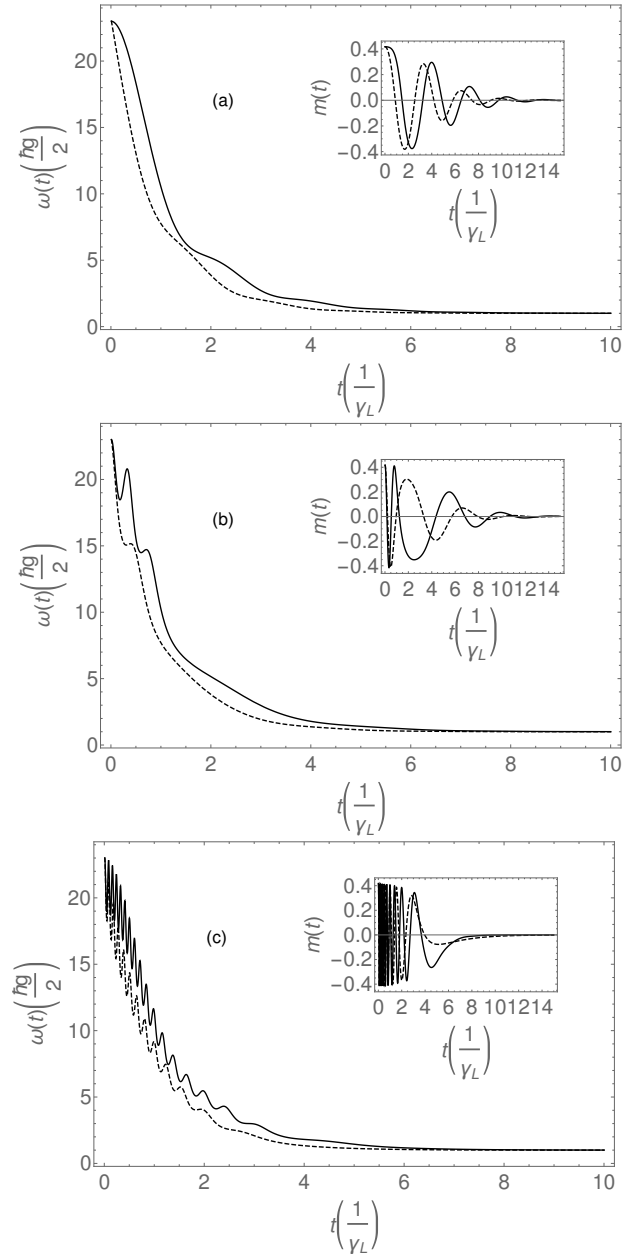


Figure 1. Frequency $\omega(t)$ (in units of $\hbar g/2$) and magnetization $m(t)$ vs time (in units of $1/\gamma_L$). Dashed line: Lindblad approximation, solid line: Redfield dynamics. (a) $\Gamma = 0.01$, $\Omega = 10$, (b) $\Gamma = 0.5$, $\Omega = 10$, (c) $\Gamma = 2$, $\Omega = 10$.

The long time behaviour of both approximations is the same, however, clear discrepancies appear at short time scales before the equilibrium. Remarkably, the longer relaxation

times and the more pronounced oscillations of the Redfield dynamics.

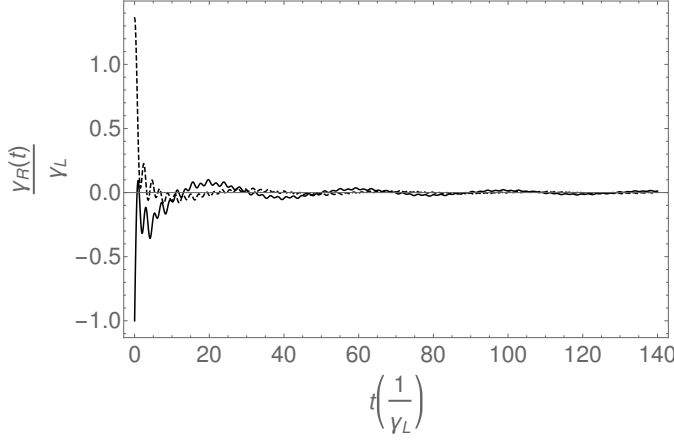


Figure 2. Magnitudes $\gamma_R(t)$ (solid line) and $\Delta_R(t)$ (dashed line) in units of γ_L vs time (in units of $1/\gamma_L$).

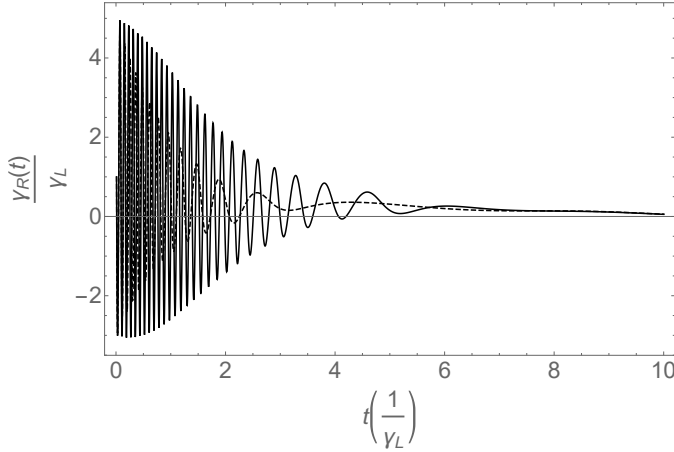


Figure 3. Decay coefficient $\gamma(t) - 4 \text{Im} \langle \hat{a} \hat{a} \rangle$ for $\omega(t)$ in units of γ_L vs time (in units of $1/\gamma_L$). Solid line: Redfield dynamics, dashed line: Lindblad approximation.

The longer relaxation time can be traced back to the role of $\gamma(t)$ in the dynamics of the system. One must notice first that in the set of equations (25)-(26), $\frac{1}{\gamma(t)}$ defines a time dependent relaxation scale of the model. It follows that $\gamma(t) = \gamma_L + \gamma_R(t)$ where the behaviour of $\gamma_R(t)$ (in units of γ_L) as function of time (in units of $1/\gamma_L$) is shown in Figure 2. From the figure, it is evident that $\gamma_R(t)$ is negative in all the relevant time interval. This immediately implies that $\gamma(t) = \gamma_L + \gamma_R(t)$ is smaller than γ_L which is consistent with the larger relaxation time of the Redfield dynamics.

On the other hand, $\omega(t)$ satisfies the equation

$$\frac{\partial \omega(t)}{\partial t} = -[\gamma(t) - 4 \text{Im} \langle \hat{a} \hat{a} \rangle] \omega(t) - [\gamma(t) - 4 \Delta(t) \text{Im} \langle \hat{a} \hat{a} \rangle]. \quad (27)$$

Due to the temporal behaviour of $\gamma(t)$ and $\Delta(t)$, shown in Figure 2, the second term in the right hand side of (27) becomes small very fast, then

$$\frac{\partial \omega(t)}{\partial t} \approx -[\gamma(t) - 4 \text{Im} \langle \hat{a} \hat{a} \rangle] \omega(t). \quad (28)$$

Therefore, the larger frequency for the oscillations of $\omega(t)$ observed in Redfield approach can be traced back to the more complex structure of the decay coefficient in (28), as shown in Figure 3.

In Figure 4 we show the results obtained when we calculate integrals in (17) and (18) using $\omega(t) = \omega_0 e^{-at}$, where a is a positive constant. We have taken the same parameters as in Figure 1c. Comparison between both graphics suggests the robustness of the results with respect to the choice of $\omega(t)$ in these integrals.

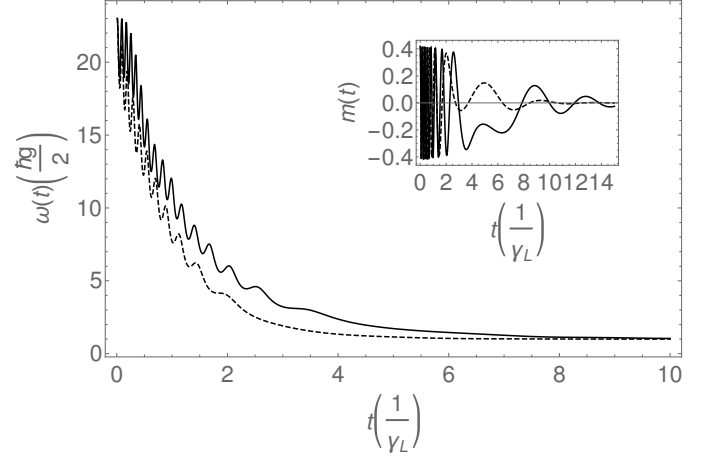


Figure 4. Frequency $\omega(t)$ (in units of $\hbar g/2$) and magnetization $m(t)$ vs time (in units of $1/\gamma_L$). Dashed line: Lindblad approximation, solid line: Redfield dynamics. The choice $\omega(t) = \omega_0 e^{-at}$ in Eqs. (17) and (18) has been used.

VI. CONCLUSIONS

We have quantitatively evaluated the effects of the Lindblad approximation in the simple case of the mean field quantum spherical spin model by considering the numerical solution of the exact Redfield equation. As expected, the long time predictions of both approximations is the same, however, important discrepancies are evident at short time scales. These discrepancies are explained unveiling the role of the Redfield contributions to the dynamical equations of the model. In particular, we can explain why Redfield approximation has longer time scales and more frequent oscillations.

ACKNOWLEDGEMENTS

MTPM acknowledges SECITI-CLAF financial support and warm hospitality received at Instituto de Física, UNAM.

REFERENCES

- [1] H-P. Breuer and F. Petruccione, The theory of open quantum systems (Oxford University Press, 2002).
- [2] H. J. Carmichael, Statistical methods in quantum optics 1, Master equations and Fokker-Planck equations (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1999).

- [3] T. H. Berlin and M. Kac, Phys. Rev. B 86, 821 (1952).
- [4] P. Shukla and S. Singh, Phys. Rev. B 23, 4661 (1981).
- [5] H. W. Lewis and G.H. Wannier, Phys. Rev. B 88, 682 (1952).
- [6] R. Cordero-Soto, W. Suazo and S. K. Suslob, Annals of Physics 325, 1884 (2010).
- [7] B. Berrabah, J. of Modern Physics 7, 359 (2016).
- [8] R. K. Colegrave and M. S. Abdalla, Optica Acta 28, 495 (1981).
- [9] T. Zech, R. Mulet, T. Wellens and A. Buchleitner, New J. Phys. 16, 05500 (2014).
- [10] S. Wald and M. Henkel, J. Phys. A: Math. Theor. 49, 125001 (2016).

ESTUDIO DEL ESPARCIMIENTO DE DPPC EN DIFERENTES CONCENTRACIONES APLICANDO TÉCNICAS ÓPTICAS DE SPECKLE DINÁMICO

STUDY OF THE SPREADING OF DPPC IN DIFFERENT CONCENTRATIONS APPLYING OPTIC TECHNIQUES OF DYNAMIC SPECKLE

J.J. LLOVERA^{a†}, A. MORENO^a, J. CRUZ^a, R. SERRA^a, D. MARTÍNEZ^b, M. ZOTTI^b, W. SHIN^b

a) Departamento de Física, Facultad de Ingeniería Automática y Biomédica, Universidad Tecnológica de La Habana “José Antonio Echeverría” Cujae; fellovera@gmail.com[†]

b) Laboratorio de Biofísica, Departamento de Física, Universidad de Sao Paulo.

[†] autor para la correspondencia

Recibido 13/5/2017; Aceptado 12/10/2017

PACS: Speckles 42.30.Ms; Optical methods in rheology 83.85.Ei; Biofilms 87.18.Fx; Rheology of surfactants 83.80.Qr

El llamado surfactante pulmonar es un tensoactivo de estructura compleja que garantiza la reducción de la tensión superficial en los alveolos pulmonares para que estos se puedan distender y contraer fácilmente en el proceso de la respiración. El mismo está compuesto en alrededor de un 70 % de una capa de moléculas fosfolípidas denominada dipalmitoil-fosfatidilcolina (DPPC) [1], sustrato en el cual se ubican las proteínas SP-A, SP-B, SP-C y SP-D responsables de los procesos de absorción selectiva del oxígeno y devolución del dióxido de carbono a nivel alveolar. La obtención por síntesis química de surfactante pulmonar artificial para el tratamiento de afecciones respiratorias debidas a su déficit, requiere lograr una concentración de DPPC que permita su fácil esparcimiento en el sustrato de líquido alveolar en el cual estará dispersado [2].

En trabajos previos se ha presentado la posibilidad de estudiar la dinámica del esparcimiento de un tensoactivo empleando la técnica de ensayo óptica basada en el speckle dinámico acompañado del procesamiento digital de las imágenes [3,4].

El sistema experimental empleado para obtener las imágenes del proceso de esparcimiento es el que se muestra en la Figura 1 y se detalla en [4].

La muestra a estudiar se conforma depositando una película de DPPC en una superficie acuosa contenida en una cápsula Petri. El procedimiento seguido fue en todos los casos grabar un video del patrón de speckle dinámico durante el proceso de esparcimiento del tensoactivo, que fue descompuesto en cuadros a los que se le aplicó un procesamiento de sustracción del fondo y binarización en niveles de gris. Posteriormente se realizó una segmentación por el procedimiento LASCA a fin de realzar las regiones de mayor contraste que son las representativas de aquellas de mayor actividad durante el esparcimiento. Finalmente mediante algoritmos basados en procedimientos de morfología matemática se delimitó el borde de la película interfacial en desarrollo durante el

proceso de esparcimiento reconstruyéndose posteriormente los videos correspondientes a los originales. Todo el procesamiento se realizó en MATLAB 7.9 (R2009b) (MatWork Inc. USA).

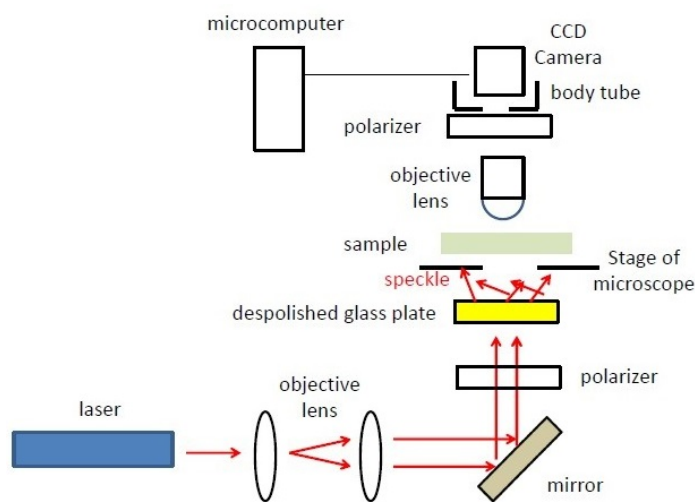


Figura 1. Esquema del sistema experimental.

Inicialmente se depositó una pequeña gota de tensoactivo en la superficie acuosa para estudiar su esparcimiento que se logra diluyendo el DPPC en cloroformo.

Siendo muy alta la concentración del DPPC se apreció un borde bien definido que se expande en la medida en que ocurre su dilución con cloroformo pero sin sufrir fragmentación, se apreció la mayor actividad y contraste en el borde interior de la frontera. Ver Figura 2.

Las imágenes así obtenidas pueden permitir el estudio de la elasticidad e histéresis de la frontera con este método y contrastarlo con los resultados obtenidos por otras técnicas [5].

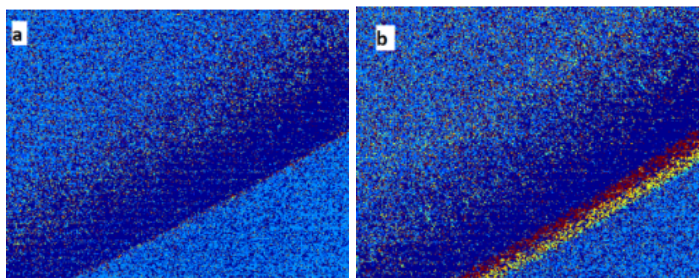


Figura 2. Imágenes LASCA (a) frontera en reposo (b) frontera esparciéndose.

Al realizar una dilución mayor de DPPC en cloroformo se forman agregados dispersos que se desplazan sin desintegrarse. El proceso se muestra en una imagen procesada LASCA y el borde del agregado definido en la Figura 3.

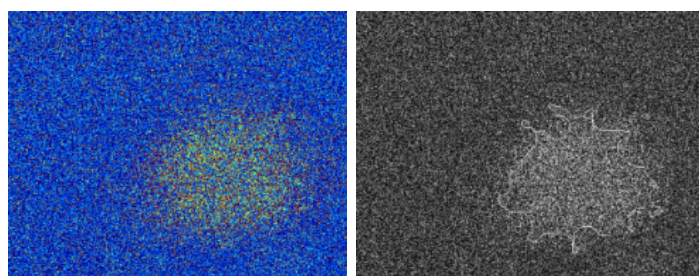


Figura 3. Imagen LASCA de una porción de DPPC y definición de su borde.

Se aprecia una similitud en la forma en que se produce la deformación del borde con emisión de protuberancias de forma caótica durante el proceso de su desplazamiento, tal dinámica de esparcimiento ha sido referenciada por otros autores [6].

Con un incremento mayor de la dilución y depositando la capa de DPPC en una solución salina de composición similar al líquido alveolar para facilitar su esparcimiento [7] en estas condiciones los agregados se expanden y fragmentan lográndose un esparcimiento del tensoactivo en porciones por toda la superficie acuosa según se aprecia en la secuencia de la imagen del borde mostrada en la Figura 4.

En resumen, se aplicó la técnica del speckle dinámico para visualizar el proceso de esparcimiento de capas de

DPPC a diferentes diluciones en cloroformo, revelándose las posibilidades que aporta esta técnica óptica al procesar digitalmente las imágenes obtenidas para estudiar cualitativamente dicho proceso.

Se demostró la factibilidad de realizar nuevas mediciones en atmósferas controladas en presión, temperatura y humedad para lograr un estudio paramétrico más completo.

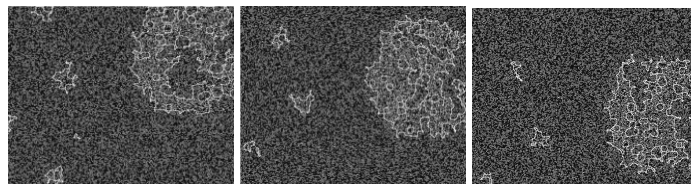


Figura 4. Secuencia de esparcimiento de DPPC con bordes definidos en solución salina.

El estudio posterior de la dinámica de esparcimiento en la frontera puede permitir evaluar la elasticidad e histéresis de la película de DPPC en este proceso.

REFERENCIAS

- [1] J. Gorke, Review. Biochim. Biophys. Acta. 1408, 79 (1998).
- [2] J.L. Bull, J.B. Grotberg Exp. Fluids 34 (2003) 1 DOI 10.1007/s00348-002-0447-2.
- [3] J. Llovera, "Speckles dinámicos en superficies acuosas", memorias de OPTELACIC (2009), ISBN: 978-959-7139-88-1, Habana, Cuba.
- [4] J. J. Llovera-González, A. Moreno, D. Martínez, M. Zotti, J. Ferreira, W. s. Nishitani, A. Barros, A. Alencar, M. Muramatsu, R. Serra Proc. SPIE Vol. 8785, 8785DI (2013) SPIE CCC code: 0277-786X/13/\$18 DOI 10.1117/12.2026326 Scopus
- [5] H. Nakahara, A. Dudek, Y. Nakamura, S. Lee, Ch. Chang, O. Shibata. Colloids Surf. B 68, 61 (2009).
- [6] K.S. Lee, N. Ivanova, V.M. Starov, N. Hilal, V. Dutschk Adv. Colloid Interface Sci. 144, 54 (2008).
- [7] A. F. Eftaiha, M. F. Paige J. Colloid Interface Sci. 353, 210 (2011).

LA FÍSICA: UNA PROTAGONISTA DE LA TERCERA REVOLUCIÓN EN LA BIOLOGÍA

PHYSICS: A MAIN CHARACTER IN THE THIRD REVOLUTION IN BIOLOGY

C. CABAL-MIRABAL^{a†}

Centro de Ingeniería Genética y Biotecnología, La Habana 10600, Cuba; carlos.cabal@cigb.edu.cu[†]

[†] autor para la correspondencia

Recibido 15/8/2017; Aceptado 7/9/2017

Se presenta la llamada Tercera Revolución en la Biología, consistente en la convergencia visceral entre las ciencias de la vida, la medicina, las ciencias básicas, las ingenierías y la computación. Se plantea la tesis de que las organizaciones que rigen la ciencia en Cuba, así como las instituciones de la Educación deben modificar su visión (incluyendo transformaciones en los planes de estudio) para lograr que el país no quede fuera del vertiginoso avance de esta Tercera Revolución.

The so-called Third Revolution in Biology is presented, which consists in the visceral convergence of life sciences, medicine, basic sciences, engineering and computer science. The idea is proposed that institutions that organize Cuban science, as well as the institutions of higher education, should modify their vision (including transformations in the curricula) to guarantee that the country is not left behind the Third Revolution.

PACS: Biological and Medical Physics, 87; Medical imaging: general, 87.57-s; Biomedical applications of nanotechnology, 87.83.+a; Biological techniques and instrumentation; biomedical engineering, 87.80.-y

Una nueva revolución científica ha irrumpido en el escenario internacional contemporáneo. Las ciencias básicas cubanas y, en especial la Física, han de tomar parte en ella si se desea mantener el desarrollo que Cuba ha logrado en el campo de la Biotecnología y la Medicina: se trata de la llamada *Tercera Revolución en la Biología* [1–6].

Como es bien conocido, la *Primera Revolución en la Biología* tuvo su momento crucial con el descubrimiento de la estructura tridimensional ADN por James D. Watson y Francis Crick en 1953, considerada como su fecha de nacimiento. Ello permitió entender las bases moleculares y celulares de los más complejos procesos biológicos. Al inicio de la década del 1970, facilitó el manejo del ADN de diferentes organismos a nivel celular para producir nuevos procesos y productos, base de la Ingeniería Genética contemporánea.

La *Segunda Revolución en la Biología* se admite universalmente como la revolución en el campo de la Genómica, en décadas más recientes. Por una parte, la Primera Revolución sentó las bases de la biología molecular, donde la molécula de ADN, soporte de la información biológica en interior de las células (“el hardware” de los procesos), ha permitido entender más profundamente la biología de los sistemas vivos y sus anomalías. Por otra parte, y de manera estrechamente ligado a lo anterior, en la 2^{da} Revolución se afirmaron las bases para entender y manipular los códigos de la transmisión de la información biológica (“el software celular”).

Las conquistas de las Ciencias de la Vida cubanas (Medicina, incluyendo la veterinaria, las ciencias agrícolas, las asociadas con la preservación y desarrollo del medio ambiente) y en particular de la Biotecnología, son consecuencias de la combinación adecuada y simultánea de varios factores:

la voluntad política del líder del proceso revolucionario cubano, las tradiciones de la biomedicina cubana, la existencia de una masa crítica de expertos comprometidos con ese gran proyecto y la ejecutoria efectiva y dinámica de destacados de líderes científicos; todo ello concomitante con la 1^{ra} y 2^{da} Revoluciones en la Biología. Se pudiera decir que la coincidencia de las revoluciones del conocimiento con el proceso de transformaciones sociales y la real existencia de voluntad política han sido factores de éxito de la Biotecnología.

La *Tercera Revolución en la Biología* consiste, en esencia y de manera sucinta, en la convergencia de las Ciencias de la Vida, con la Física, con las Ingenierías, la Computación y las Matemáticas [1–3].

La nueva contribución de la Física y demás ciencias básicas a las Ciencias de la Vida esta vez cobra un ritmo y una intensidad inconmensurablemente mayor de aquellas que ocurrieron a lo largo de la historia de la Medicina cuando se revolucionaron los métodos de diagnóstico y terapéutica a partir de los colosales descubrimientos de las ciencias Naturales primordialmente a finales del siglo XIX hasta mediados del siglo XX.

Esta convergencia no reside solo en trasladar herramientas y métodos de la Física, las Ingenierías, la Computación y las Matemáticas a la Biología, sino también, se presenta con nuevos enfoques y paradigmas. Se trata de una interrelación más profunda entre estas ciencias para abordar los complejos problemas de los sistemas biológicos de donde las ciencias convergentes con la Biología también salen favorecidas.

Simultáneamente con la Tercera Revolución en la Biología están ocurriendo otras que la catalizan. Una de ellas es la de las tecnologías cuánticas [4] con los relojes, computadoras

y sensores cuánticos para usos biomédicos incrementando en varios órdenes de magnitud la sensibilidad, la resolución y exactitud de las mediciones (en particular de las multiplicidades de imágenes biomédicas), como se ilustra en la Figura 1. Surgen nuevos métodos de modelación y simulación cuántica, de generación y transmisión de la energía, materiales con nuevas y sorprendentes características, entre otros elementos [4]. Estas otras revoluciones plantean nuevos desafíos a la enseñanza de la Física desde el punto de vista de la formación teórica y experimental; ambas deterioradas a grados preocupantes en nuestro país. Nos enfrentamos a una nueva visión de la interrelación de las Ciencias Básicas con las tecnologías y las ingenierías. Nos enfrentamos también a la visión clásica de las tecnologías en conjunción con aquellas nuevas visiones y paradigmas con enfoques cuánticos, moleculares, niveles micro, nano y sub nanométricos. Nos enfrentamos al reto de crear motivación hacia nuestra ciencia, en antagonismo al desenfrenado interés pragmático y simplista del mundo contemporáneo.



Figura 1. Línea hipotética del tiempo de las tecnologías cuánticas

Muchas de las regularidades y tendencias de esta acelerada inflexión en el desarrollo vienen gestándose desde hace unos pocos años atrás [1–3, 5]. Enunciamos solo algunos rasgos distintivos de las transformaciones científicas y tecnológicas que están en la base de esta 3^{ra} Revolución en la Biología:

- Impetuoso desarrollo de las tecnologías de la información. Aumento de las capacidades de almacenamiento y post procesamiento de grandes bases de datos.
- Diseño, síntesis, manejo a distancia de nano sistemas inteligentes. Micro fabricación de nuevas herramientas de ingeniería molecular a escalas nanométricas.
- Incremento de la sensibilidad, exactitud y resolución de los sistemas mediciones cuantitativas, permitiendo la visualización de los procesos a todas las escalas de la organización de la sustancia, lo que renueva el arsenal de métodos de imágenes existente y crea las plataformas para otros nuevos.
- Se han hecho más evidentes, cuantificables y transformables las relaciones entre las biomoléculas y las otras estructuras de los seres vivos. Los procesos fisiológicos son más expresables a través de cifras, fórmulas, algoritmos y modelos cuantitativos, que describen con más rigor los estados normales y patológicos de las biomoléculas, las células, los tejidos,

órganos y organismos. Nacen métodos más precisos para conocer en tiempo real la cantidad, movilidad, formas de interacción de las moléculas, los metabolitos y las células, que facilitan un diagnóstico y un actuar precoces a esos niveles, con una mayor eficacia terapéutica

- Convergencia, a nivel molecular e instrumental, de los métodos de diagnóstico y de terapéutica (Teranóstica), de evaluación y de modificación de los sistemas biológicos bajo estudio [5, 6] (ver Figura 2).
- Nuevos materiales, Meta-materiales, y nano-materiales, con propiedades y características nunca antes esperadas. Manejo (diseño, modificación, estructuración, creación y producción) de micro fluidos y de sistemas de pocos átomos, moléculas, y células. Aparecen nuevos ingenios basados en mecanismos biológicos.
- Comprensión de la cinética de procesos complejos. Creación, manejo, simulación y modelación de nuevos sistemas complejos.
- Control dinámico de procesos tecnológicos a nivel molecular y celular, permitiendo la aparición de nuevos dispositivos que sustituyen, corrigen complementan funciones biológicas.

De todos y cada uno de los puntos arriba mencionados, y de otros omitidos, existen múltiples realizaciones concretas y exitosas que en el momento actual están pujando por cambiar los enfoques, los paradigmas, las posibilidades y modos de actuar en los sistemas de I+D y de salud en el campo de las Ciencias de la Vida.

La efectividad de ese proceso de convergencia característico de esta Tercera Revolución está determinado, en gran medida, por la efectividad de las interconexiones entre las universidades y los institutos de investigación para convertir rápidamente los nuevos descubrimientos en productos [1–3, 5]. Las nexos, la identificación de proyectos y oportunidades, las proporciones entre las investigaciones y los desarrollos básicos y aplicados, adquieren una trascendente connotación.

Sin embargo, el carácter transdisciplinario de esta reciente revolución y las estructuras tradicionales universitarias, plantean también a la Educación Superior retos de naturaleza organizativa para lograr visiones más allá de disciplinas concretas, y que el flujo de resultados se incremente de acuerdo con la dinámica del estado del arte mundial.

En ese contexto una fortaleza las Universidades cubanas; y de otras entidades de Ciencia, Tecnología e Innovación; radica en que poseen un conjunto de centros y grupos de investigación con resultados de alto valor en los campos Física Teórica, de la Biofísica, la Bioingeniería, Física de los materiales, y en particular, en los Biomateriales, la Bioinformática, la Bio-matemática y los equipos médicos. Sin embargo, la existencia de una relativa dispersión de las líneas de investigación, no siempre coherentes con los propósitos de más largo alcance, que muchas veces responden a objetivos

de bajo o mediano impacto, limita la trascendencia de los resultados de investigación-desarrollo. Esos centros y colectivos expertos constituyen el núcleo para el diseño de una adecuada estrategia organizativa para gestar una convergencia más efectiva entre la Física y demás Ciencias Naturales, la Matemática, las Ingenierías y las Ciencias de la Vida, de acuerdo a las tendencias modernas.

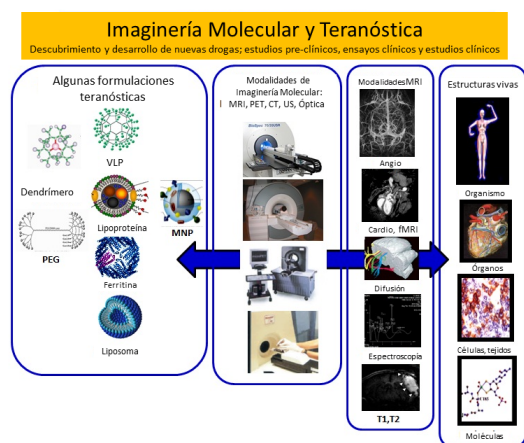


Figura 2. Ingeniería Molecular y Teranóstica.

A su vez, es imperioso también incrementar las inversiones que beneficien aquellas investigaciones y desarrollos (I+D) en las Ciencias de la Vida que fortalezcan conexiones cualitativamente superiores con las Ingenierías, la Física y demás Ciencias Naturales y Exactas. Esas inversiones no pueden regirse por los cánones clásicos ni en los conceptos, ni en cuantía, ni en ritmo.

Expertos aseveran [1–3] que esta Tercera Revolución implica avances inusuales no solo en la Biomedicina sino en la producción agrícola, las nuevas formas de energía, la sostenibilidad ambiental y la seguridad nacional.

Resulta así imprescindible ponderar, rápida y profundamente, los procesos que tienen lugar a consecuencia de estas revoluciones y diseñar un conjunto de acciones entre las que deberían de estar:

1. Evaluar y discutir científicamente en todas las instancias (proyectos, Consejos Científicos y de Dirección, la Academia de Ciencias de Cuba, etc.) las regularidades, las tendencias, y las oportunidades de la Tercera Revolución en la Biología, concretando planes de acción a corto, mediano y largo plazo. Incluir el tema en la vigilancia tecnológica, ampliando y compartiendo la información existente.
2. Fortalecer nexos reales, sistemáticos, cualitativos y cuantitativamente superiores entre las Universidades, BioCubaFarma y otras entidades de investigación científica y desarrollo en las esferas biológicas a partir de nuevos principios organizativos más dinámicos y efectivos.
3. Incrementar el monto del financiamiento dedicado a la I+D, incluyendo proyectos de carácter básico que converjan con los intereses de programas biológicos,

biotecnológicos, farmacéuticos y biomédicos cubanos. Disminuir los plazos de los sistemas de abastecimientos de la Ciencia, la Tecnología, la innovación, al menos en estos campos.

4. Modificar los planes de estudio, en pre y post grado, de las carreras de Física, las ingenierías, Matemática, Química, Biología y la Medicina para que la presencia de las ciencias básicas implicadas sean fortalecidas. A su vez, las materias biológicas optativas modernas deberán tener presencia en la formación de los físicos. En la carrera de Física es imperativo elevar la formación teórica y experimental con énfasis en Física Molecular, el diseño, la caracterización y obtención de nano-sistemas, énfasis en las tecnologías cuánticas, la electrónica cuántica y molecular, las tecnologías de la información y las comunicaciones, entre otros.
5. Desarrollar un sistema intenso y sistemático de divulgación de estos procesos en la comunidad científica, médica, escolar y masiva incrementando la motivación por las Ciencias Naturales y Exactas, las Ingenierías, y las carreras de perfil biológico.

Cuba posee condiciones para enfrentar este nuevo desafío. Tomar conciencia de estas oportunidades para la Física cubana es condición necesaria pero no suficiente. De no actuarse, o de hacerlo lenta y parcialmente, se perderá la oportunidad de participar en esta Tercera Revolución del conocimiento de las ciencias de la Vida y se disparará también el liderazgo relativo alcanzado en las esferas biotecnológica, farmacéutica y biomédica cubanas como consecuencia de la pérdida de valor agregado de los productos y, por consiguiente, de competitividad.

REFERENCIAS

- [1] Committee on Key Challenge Areas for Convergence and Health; Board on Life Sciences; Division on Earth and Life Studies; National Research Council Convergence: Facilitating Transdisciplinary Integration of Life of Sciences, Physical Sciences, and Engineering and Beyond. The National Academic Press Washington DC, (2014) (<http://ciret-transdisciplinarity.org/quoideneuf/NSF-Report-on-TD.pdf>).
- [2] P. Sharp *et al.* (eds.) Convergence: The Future of Health. (MIT Press, Cambridge, Massachusetts 2016).
- [3] P. A. Sharp *et al.* (eds.) The Third Revolution: The Convergence of the Life Sciences, Physical Sciences, and Engineering. (MIT press, Cambridge, Massachusetts 2011). (www.aplu.org/projects-and-initiatives/research-science-and-technology/hibar/resources/MITwhitepaper.pdf).
- [4] A. de Touzalin *et al.* Quantum Manifesto A New Era of Technology. European Commission (2016) (<https://time.tno.nl/media/7638/quantum-manifesto.pdf>).
- [5] C. Cabal, Rev. Cubana Salud Pública, 34, 1 (2008).
- [6] C. Cabal, D. Darias, E. González A. Musacchio, Biotecnol. Aplicada, 30, 172 (2013).

OLIMPIADAS UNIVERSITARIAS DE FÍSICA: UN RECORRIDO POR SUS RESULTADOS DESPUÉS DE CINCO EDICIONES

UNIVERSITY PHYSICS OLYMPIADS: A JOURNEY THROUGH THEIR RESULTS AFTER FIVE EDITIONS

H. BORROTO^{a†} Y A. BORROTO^{a,b}

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

b) Institut Jean Lamour, UMR CNRS 7198, Université Lorraine, CS 50840 Parc de Saurupt, 54011 Nancy, France

[†] autor para la correspondencia

Recibido 25/9/2017; Aceptado 11/10/2017

Desde el año 2013 se celebran en Cuba las Olimpiadas Universitarias de Física, cinco ediciones hasta el actual 2017, con participación de estudiantes latinoamericanos en las dos últimas. En este trabajo se muestra un recorrido por los temas presentados en los problemas y los resultados obtenidos por los participantes, desglosados por olimpiada y por año académico. Los temas fueron divididos en tres tipos: problemas tradicionales, problemas relacionados con la ciencia actual, y problemas poco comunes. Los datos presentados, permiten hacer una comparación del desempeño de los estudiantes por los diferentes tipos de problemas y por año académico.

Since 2013, five editions of the University Physics Olympics have taken held in Cuba, with participation of Latin American students in the last two. In this paper we review the different topics approached by the problems proposed in the Olympics, as well as the performance of the competitors, for each Olympiad and academic year. The topics were divided into three types: traditional problems, problems related to current science, and unusual problems. The results allow making a comparison of the performance of the students depending on the type of problems and academic year.

PACS: Physics education, 01.40.-d; Physics careers, 01.85.+f; Physics tournaments, 01.50.Rt

I. INTRODUCCIÓN

Teniendo como precedente las Olimpiadas Nacionales Universitarias de Matemática y a sugerencia de un grupo de profesores de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana (FFUH), surgieron en el año 2013 las Olimpiadas Nacionales Universitarias de Física (ONUF). Las Olimpiadas son organizadas por la Sociedad Cubana de Física y la Facultad de Física de la Universidad de la Habana. Estas dan la posibilidad a estudiantes universitarios, de las carreras de física e ingeniería fundamentalmente, de medir sus habilidades y conocimientos en un concurso de problemas, en este caso solo teóricos, dada la imposibilidad práctica de preparar problemas experimentales a nivel nacional. Las ONUF acogieron por primera vez en 2016 a estudiantes de tres universidades foráneas y en 2017 la convocatoria fue abierta a todos los países de Latinoamérica y el Caribe contando con el coauspicio del Centro Latinoamericano de Física (CLAF) y de la UNESCO [1].

De esta forma, la olimpiada de 2017 se constituyó como la 1^{ra} Olimpiada Latinoamericana Universitaria de Física (OLUF) con la participación de 78 estudiantes de universidades latinoamericanas (Brasil, Colombia, México, Perú, Guatemala, El Salvador, Argentina y Bolivia), siendo el ganador absoluto un estudiante de 1^{er} año de la Universidad de Sao Paulo, Brasil. Resultaron también medallistas de oro por Cuba dos estudiantes de 1^{er} año de la FFUH [2].

La OLUF ha venido a dar continuidad a la formación de aquellos estudiantes que han participado en el nivel preuniversitario en, concursos nacionales de conocimientos en Física y Olimpiadas: Centroamericanas, Iberoamericanas o Internacionales de Física (IPhO). Un grupo importante de los mejores estudiantes que ingresan a las carreras de Física en las universidades han tenido participación previa, en este tipo de actividades. En el caso de las Olimpiadas, los estudiantes que participan representado a sus países, pertenecen a las preselecciones nacionales y reciben algún tipo de entrenamiento. En el caso de Cuba reciben al menos, de uno a tres años de preparación en el Centro Nacional de Entrenamiento¹. Esta preparación, enfocada a la resolución de problemas, es realizada por un grupo de destacados profesores de preuniversitario, con gran experiencia y un alto grado de preparación en las materias que entrenan. Las habilidades y conocimientos con que ingresan estos estudiantes para resolver problemas son muy superiores a las que brindan los programas de enseñanza de la física de preuniversitario, lo cual supone una ventaja respecto a otros que ingresan con la preparación que normalmente da, o en muchos casos ni siquiera da, el preuniversitario. Por supuesto que entre los que ingresan sin haber transitado por las preselecciones nacionales, existen también estudiantes muy talentosos que después de pasar por los primeros años de la carrera, se nivelan y logran resultados destacados como corresponde con futuros científicos o ingenieros, y son otras las habilidades que deben desarrollar.

¹Concentrado donde se preparan a los estudiantes con mejores resultados en los concursos nacionales de Física, Matemática, Química, Computación y Biología. Estos estudiantes integran una preselección de la cual se eligen los equipos para asistir a las olimpiadas citadas.

En el presente artículo se muestra el impacto que tienen las preselecciones nacionales a nivel preuniversitario sobre el posterior resultado de los estudiantes en las Olimpiadas Universitarias. Además, los problemas presentados en cada una de las olimpiadas [3] son divididos en tres grupos, lo cual permite comparar el desempeño de los estudiantes en cada uno de estos grupos, tanto de forma general, como desglosados por año académico.

II. RESULTADOS U DISCUSIÓN

II.1. Los premiados y la preselección nacional de física

Una revisión de las listas de participantes y los resultados obtenidos luego de cinco olimpiadas universitarias realizadas, muestra que el 73 % de los premiados con cualquier medalla (oro, plata o bronce) proceden de las preselecciones nacionales de física de preuniversitario, como se observa en la Figura 1, mientras que estos representan el 24 % entre los participantes en general. En esta figura también se muestra la evolución del porcentaje de estudiantes premiados provenientes de la preselección nacional de física en cada una de las olimpiadas. Nótese que en las olimpiadas de 2016 y 2017 se han tenido en cuenta solo los premiados cubanos. Si consideramos solo a los medallistas de oro y plata el porcentaje es aún mayor (90 %) y si tenemos en cuenta los cuatro ganadores absolutos por Cuba (en la olimpiada de 2017 el ganador absoluto fue un estudiante de Brasil), todos provienen de la preselección nacional. La Figura 1 es una muestra del impacto directo que tiene la preselección nacional de física sobre el posterior desempeño de los estudiantes a nivel universitario.

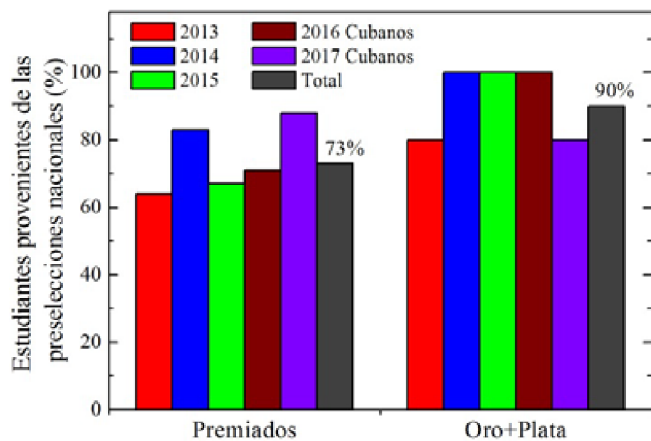


Figura 1. Porcentaje de estudiantes premiados en las olimpiadas universitarias provenientes de las preselecciones nacionales.

Otro punto importante con respecto a los estudiantes premiados es el incremento de estudiantes de los primeros años de la carrera en las dos últimas ediciones. Una primera muestra de este incremento se refleja en los ganadores absolutos de las diferentes olimpiadas. En las tres primeras los ganadores absolutos eran estudiantes de 4^{to} y 5^{to} año, sin embargo en las dos últimas aparecen estudiantes de 3^{ro} y 1^{er} año. En cuanto a premiados, se aprecia también una

significativa mejoría de los estudiantes de los primeros años en las olimpiadas de 2016 y 2017, tal como se muestra en la Figura 2.

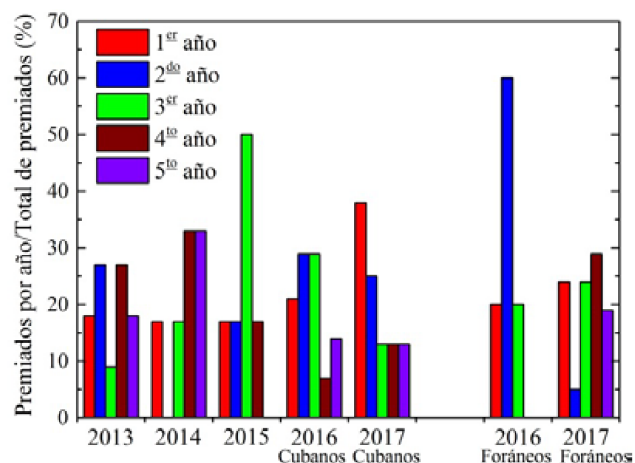


Figura 2. Porcentaje de medallistas por año de carrera que cursan respecto al total de premiados. En las olimpiadas de 2016 y 2017 se muestran separados los resultados de los estudiantes cubanos y los estudiantes foráneos.

Nótese que esta mejoría es más notable si tenemos en cuenta solo los resultados de los estudiantes cubanos. El hecho de que la mayoría de los estudiantes cubanos premiados en las dos últimas olimpiadas se encuentren en los primeros años de la carrera, está directamente relacionado con la mejoría en la calidad de los resultados en los últimos dos años en las Olimpiadas Iberoamericanas e Internacionales de Física, una vez más, gracias a la labor del equipo de entrenadores de la preselección nacional; y el posterior ingreso de los estudiantes premiados en las universidades. En los últimos años, volvió a incrementarse la participación en estas olimpiadas, especialmente en las Iberoamericanas. Por un breve período, anteriormente se limitó la participación, e incluso Cuba dejó de participar en las Internacionales.

II.2. Estudiantes aprobados. Desempeño por año académico y por los diferentes temas

En general, dado el alto grado de dificultad de la mayoría de los ejercicios propuestos, típico de una olimpiada de conocimientos, los porcentajes de aprobados respecto al número de concursantes presentados son bajos, aun cuando el criterio de aprobado tomado fue tener más del 50 % de los puntos asignados a cada ejercicio.

La Figura 3 muestra en cada olimpiada, y en general, la cantidad de estudiantes con problemas aprobados por año académico. Resulta notable la mejoría en los resultados obtenidos por los estudiantes de 1^{er} año en las últimas olimpiadas.

La figura también muestra que en general los estudiantes de 3^{er} año han aprobado la mayor cantidad de problemas, lo cual puede estar relacionado con que en este momento de la carrera, a las habilidades en la solución de problemas, los estudiantes agregan haber terminado de

recibir recientemente todas las asignaturas de la física general, materia en la que se concursa en estas olimpiadas universitarias.

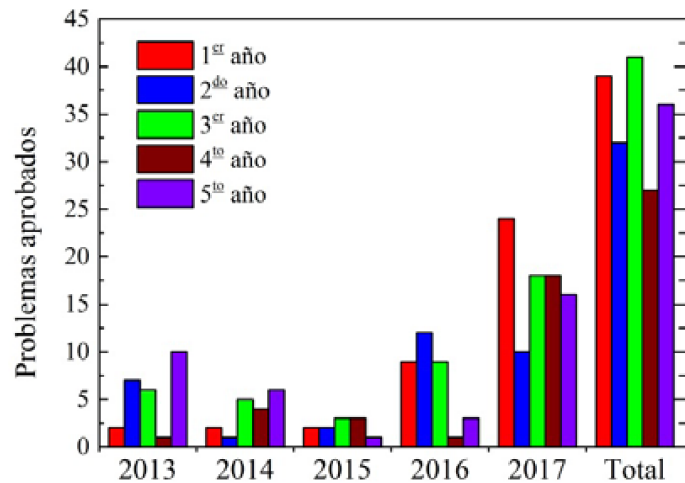


Figura 3. Número de problemas aprobados en cada una de las olimpiadas desglosados por año académico.

Tabla 1. Temas de los problemas presentados en las Olimpiadas Universitarias

Año	#	Temas
2013	1	Ondas ultrasónicas en el agua
	2	Mecánica-electromagnetismo
	3	Grafeno: conducción de e ⁻
	4	Termodinámica
	5	Mecánica: modelo de espagueti
2014	6	Óptica-mecánica
	7	Efecto invernadero. Calentamiento global
	8	Superconductividad: interacción con un imán
	9	Modelo de mesón (cuerdas)
	10	Materia oscura: un universo peculiar
2015	11	Conductividad térmica
	12	Vuelo de una abeja
	13	Mecánica: retroceso de un aro rodando
	14	Electromagnetismo: líneas de fuerzas
	15	Estructura fina: absorción de rayos X
2016	16	Mecánica
	17	Electromagnetismo
	18	Óptica: a la caza de un pez
	19	Molecular: estimar la altura de las nubes
	20	Moderna: emisión LASER
2017	21	Termodinámica: condensación de vapores
	22	Metrología: el kg y el S.I
		Métodos cuánticos de calibración
	23	Mecánica-electromagnetismo
	24	Moderna: fotoefecto, dispersión angular de fotoelectrones
	25	Analogía electro-magnetogravitacional

En las tablas 1 y 2 mostramos los temas de los problemas presentados en cada una de las olimpiadas así como la cantidad de estudiantes aprobados desglosándolos por año de carrera, destacando el porcentaje de aprobados en cada problema. También mostramos una clasificación de los temas de los problemas agrupándolos en: problemas tradicionales (Trad.) (generalmente de tipo académico, con una carga de idealizaciones), problemas relacionados con

la ciencia actual (C.A.) (menos convencionales, relacionados con alguna temática actual de la ciencia o la tecnología), y problemas poco comunes (P. C.) (algo “extraños”, donde se requiera de gran originalidad y creatividad). Utilizando los datos de la tabla 2, construimos la Figura 4 en la que comparamos los resultados en cuanto a los tipos de problemas antes descritos. Varios aspectos interesantes se pueden resaltar de los resultados mostrados en esta figura. En primer lugar, el mejor desempeño de los estudiantes es en los problemas tradicionales (14 % de aprobados). Algunos de estos combinan temas, mientras otros tratan de una sola temática. Estos son los que más han enfrentado a lo largo de la enseñanza de la física en los diferentes niveles desde la secundaria hasta la propia universidad.

Tabla 2. Clasificación de los problemas y porcentaje de aprobados en cada uno. En las últimas cinco columnas se muestra el número de estudiantes aprobados por año académico

#	Clasif.	% aprob	1 ^{ro}	2 ^{do}	3 ^{ro}	4 ^{to}	5 ^{to}
1	Trad.	7 %			1		2
2	Trad.	12 %		2	1		2
3	C.A.	12 %		1	1	1	2
4	Trad.	29 %	2	4	4		4
5	P.C.	2 %					1
6	Trad.	12 %	1		2	1	2
7	C.A.	14 %	1	1	3	2	
8	C.A.	6 %				1	2
9	C.A.	2 %					1
10	C.A.	2 %					1
11	Trad.	11 %		1	2	1	1
12	P.C.	2 %				1	
13	Trad.	11 %	2	1	1	1	
14	Trad.	0					
15	C.A.	0					
16	Trad.	8 %	1	2	1	0	1
17	Trad.	39 %	7	9	6	1	1
18	Trad.	0					
19	P.C.	2 %	1				
20	C.A.	7 %		1	2		1
21	Trad.	9 %	4		2	3	1
22	C.A.	24 %	5	3	7	3	8
23	Trad.	22 %	6	4	8	5	3
24	C.A.	19 %	6	1	3	5	5
25	C.A.	6 %	3			2	1

Otro punto importante es que la mayoría de los que han aprobado los problemas tradicionales han sido estudiantes de los primeros años mientras que lo contrario ocurre con los de ciencia actual. Además, el desempeño en los ejercicios vinculados con problemáticas actuales de la ciencia o la tecnología es inferior (11 % de aprobados). Este desempeño puede ser una muestra de que la introducción de este tipo de problemas, adecuado a los diferentes niveles de enseñanza debe ser incrementada, para acercar la formación de nuestros estudiantes a la de los países con mayor desarrollo educacional y científico-tecnológico. Por último, el desempeño más pobre es en el último grupo donde se encuentran tres problemas “poco comunes”: solo un estudiante aprobado por problema para un 2 % del total. Este tipo de ejercicio debiera también ser fomentado para incentivar la originalidad y creatividad de nuestros

estudiantes, lo cual puede contribuir también a la formación de profesionales más competentes.

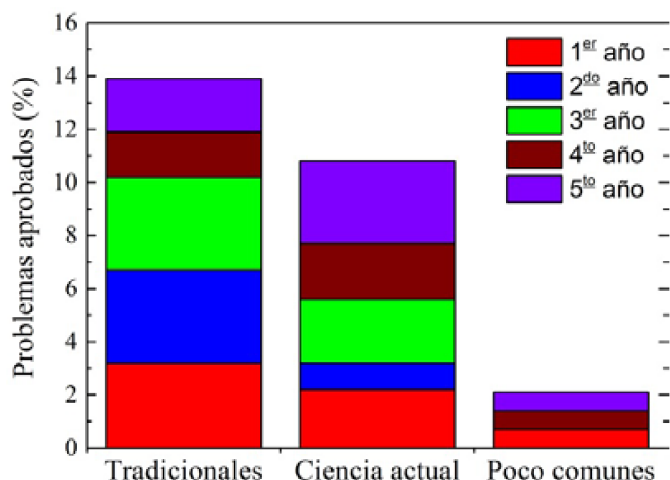


Figura 4. Clasificación por el tipo de problema.

III. CONCLUSIONES

La realización de las Olimpiadas Universitarias de Física ha contado ya con cinco ediciones en las que se han presentado diversos tipos de problemas, relacionados con temas que hemos clasificado en: tradicionales, relacionados con la ciencia actual y “poco comunes”, todos enmarcados en temas de física general. A partir de la presentación y valoración de los resultados por temas y por años académicos, fue posible establecer comparaciones que nos muestran que los resultados en problemas vinculados con la ciencia y tecnología actual, son inferiores a los que obtienen los estudiantes en los que hemos llamado tradicionales, que son los que más abundan en los diferentes niveles de enseñanza

de la física. Incrementar el número de los primeros, debe contribuir a una mejor formación y actualización de nuestros estudiantes. Aún más pobres fueron los resultados en los que llamamos “poco comunes”, aunque la muestra fue poco representativa. De todos modos, sería bueno para el desarrollo de nuestros futuros profesionales, también incrementar el número de este tipo de problemas, aunque no tengan necesariamente el nivel de una olimpiada de conocimientos.

El análisis de los premiados por año, y de la contribución a estos de los estudiantes de las diferentes universidades del país que proceden de las preselecciones nacionales y han participado en Olimpiadas Centroamericanas, Iberoamericanas e Internacionales de Física, muestra la importancia de fomentar la participación en estos eventos, y de la labor desarrollada por los entrenadores de estas preselecciones, por lo que esta actividad debiera mantener el apoyo de las universidades y de las instituciones. El desarrollo de la ciencia en nuestro país será beneficiado con ello.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen al colectivo de profesores encargados de la confección y calificación de los problemas presentados en cada una de las olimpiadas.

REFERENCIAS

- [1] <http://www.unesco.org/new/es/office-in-montevideo/about-this-office/singleview/news/first-latin-america-and-the-caribbean-physics-olympiads/>
- [2] M. Sánchez-Colina, Rev. Cub. Fis. 34, 2 (2017).
- [3] <http://scf.fisica.uh.cu/es/bases>

ONDAS DEL ESPACIO-TIEMPO: EL NOBEL DE FÍSICA 2017

WAVES OF THE SPACE-TIME: THE PHYSICS NOBEL 2017

D. MANREZA PARET^{a,b,†}, A. PÉREZ MARTÍNEZ^c

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

b) Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 70-543, CdMx 04510, México

c) Instituto Cibernética, Matemática y Física, Ciudad de La Habana. aurora@icimaf.cu

[†] autor para la correspondencia

Recibido 1/11/2017; Aceptado 10/11/2017

Las primeras detecciones de forma directa de ondas gravitacionales han abierto nuevas vías para investigar el universo. Para lograrlo fueron necesarios años de refinamiento de ingeniosas técnicas experimentales y teóricas que han traído como resultado una nueva generación de observatorios que prometen novedosas formas de ver las señales provenientes de violentos eventos cósmicos. Estos observatorios todavía están en desarrollo y aún no alcanzan su óptima sensibilidad, pero ya muestran resultados muy prometedores. Discutimos los resultados de estos importantes hallazgos así como aspectos experimentales y teóricos acerca de las ondas gravitacionales que han derivado en el otorgamiento del Premio Nobel de Física 2017.

The first direct detections of gravitational waves have opened new ways to investigate the universe. The achievement took years of refinement of ingenious experimental and theoretical techniques resulting in a new generation of observatories that promise novel ways of seeing the signals coming from violent cosmic events. These observatories are still under development and have not yet reached their optimum sensitivity, but already show very promising results. We discuss the results of these important findings as well as experimental and theoretical aspects of gravitational waves resulting in the Physics Noble Prize of 2017.

PACS: Gravitational waves, 04.30.-w; Gravitational wave detectors and experiments, 04.80.Nn, Numerical relativity 04.25.D-

I. INTRODUCCIÓN

La historia de las ondas gravitacionales se remonta 100 años en el pasado cuando en 1915 Albert Einstein formula la teoría de la Relatividad General y en 1916 obtiene que las soluciones de las ecuaciones linealizadas a campo débil son ondas transversales moviéndose a la velocidad de la luz [1,2]. Por muchos años se pensó que estas ondas de espacio-tiempo solo eran un resultado teórico y que nunca iban a poder ser detectadas. Sin embargo, el 14 de septiembre del año 2015 se realizó la primera detección directa de una onda gravitacional. Este resultado fue publicado el 11 de febrero de 2016 en la revista Physical Review Letters [3].

las ecuaciones de Einstein

$$G_{\mu\nu} = \kappa T_{\mu\nu}, \quad (1)$$

donde en el miembro izquierdo aparece el tensor de Einstein, que es función de derivadas del tensor métrico ($g_{\mu\nu}$), el cual describe la curvatura del espacio-tiempo. En la parte derecha está el tensor de energía-momento, que describe la distribución de materia y $\kappa = \frac{8\pi G}{c^4}$, que es una constante dependiente de la constante de Gravitación y de la velocidad de la luz.

En general, las ecuaciones (1) son un conjunto de diez ecuaciones no lineales en derivadas parciales, por lo que sus soluciones son bien complicadas.

II. ¿QUÉ SON LAS ONDAS GRAVITACIONALES?

De forma general, una onda es una oscilación que transporta energía. Las ondas pueden ser mecánicas, si la oscilación se propaga en un medio, o electromagnéticas si son oscilaciones de campos eléctricos y magnéticos debido al movimiento acelerado de cargas eléctricas. En particular, las ondas gravitacionales son producidas por el movimiento acelerado de masas, las cuales provocan fluctuaciones en la curvatura del espacio-tiempo, es decir, son deformaciones periódicas del espacio-tiempo que afectan las distancias relativas entre puntos del espacio.

En la Figura 1 se muestra una ilustración artística de cómo se pueden representar estas fluctuaciones del espacio-tiempo. Las ondas gravitacionales se obtienen como soluciones de

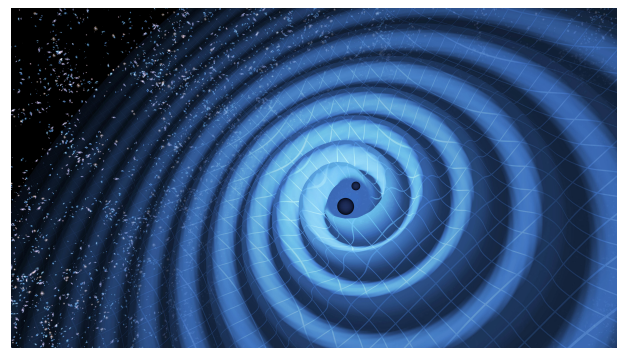


Figura 1. Representación artística de la colisión de dos agujeros negros y las ondas gravitacionales emitidas. Crédito de la imagen: LIGO/T. Pyle

Para obtener ondas gravitacionales Einstein hizo algunas aproximaciones. Primero consideró la solución de las

ecuaciones en el vacío, es decir, tomó que $T_{\mu\nu} = 0$ e ignoró los efectos no lineales, de manera que la métrica se podía escribir como $g_{\mu\nu} = \eta_{\mu\nu} + h_{\mu\nu}$, siendo $\eta_{\mu\nu}$ la métrica del espacio plano y $h_{\mu\nu}$ una pequeña perturbación a este espacio ($|h_{\mu\nu}| \ll 1$). Así, las ecuaciones (1) se reducen a

$$\square h_{\mu\nu} = 0, \quad (2)$$

donde $\square = -\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \nabla^2$ es el operador de D'Alembert. La ecuación (2) es una ecuación de onda cuya solución típica (para el caso de una onda que viaja en la dirección z) tiene la forma

$$h_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h_+ & h_\times & 0 \\ 0 & h_\times & h_+ & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

con h_+ y $h_\times$ las únicas componentes no nulas que corresponden a las posibles polarizaciones (+ y $\times$) de la onda, respectivamente.

El efecto del paso de esta onda sobre un anillo de masas de prueba es contraer y dilatar las distancias en direcciones ortogonales, como se muestra en la Figura 2.

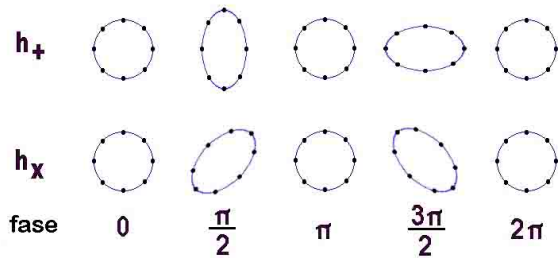


Figura 2. Efectos de una onda gravitacional sobre un anillo de masas de prueba. Se muestran los efectos de las dos posibles polarizaciones (+ y $\times$) [4].

Por tanto, podemos caracterizar las ondas gravitacionales como ondas que viajan a la velocidad de la luz con dos polarizaciones y cuya amplitud se determina por la magnitud adimensional $h = 2\frac{\Delta L}{L}$, donde L es la longitud entre dos masas de prueba y ΔL son las variaciones de esa longitud.

A diferencia de las ondas electromagnéticas, para las que el término dominante en la emisión proviene del momento dipolar, para las ondas gravitacionales el momento dipolar es cero (una consecuencia de que no hay masas negativas y positivas), por lo cual domina el término cuadrupolar. De este modo la amplitud de las ondas gravitacionales es proporcional a la segunda derivada del cuadrupolo de masa de la fuente. Esto implica que no hay distribuciones de materia esféricamente simétricas que emitan ondas gravitacionales.

Si bien todos los movimientos acelerados de masa asimétrica emiten ondas gravitacionales, al ser la interacción gravitatoria muy débil, son necesarios eventos donde grandes masas realicen movimientos muy acelerados para que generen perturbaciones en el espacio tiempo que puedan

ser medibles. Esto significa que las principales fuentes de ondas gravitatorias con potencial para ser detectables, son:

1. Sistemas binarios de agujeros negros o de estrellas de neutrones: mientras el radio de la órbita del sistema binario disminuye al acercarse ambos objetos compactos, se emiten ondas gravitacionales.
2. Explosiones de estrellas en forma de Supernovas: si la explosión es asimétrica, grandes cantidades de materia son expulsadas a grandes velocidades, lo cual produce radiación gravitacional.
3. Estrellas de neutrones rotatorias: aunque en general las estrellas de neutrones que rotan son objetos esféricamente simétricos, en algunos casos la estrella puede estar deformada y por tanto emite radiación gravitatoria.
4. Inflación: muchos modelos cosmológicos postulan que en etapas muy tempranas de la evolución del universo, este se expandió de forma acelerada. Si esta expansión fue asimétrica, pudo haber emitido ondas gravitacionales.

La primera evidencia indirecta de la existencia de ondas gravitacionales se obtuvo gracias a la detección del pulsar binario PSR B1913+16 por Hulse y Taylor en 1975 [5]. El cuidadoso estudio de este sistema binario formado por dos estrellas de neutrones de aproximadamente $1.4 M_\odot$ ($M_\odot$ es la masa del sol), separadas una distancia de 2×10^6 km, del orden del diámetro del Sol, mostró que el radio de la órbita disminuía de una forma tal que concordaba exactamente con las predicciones de la relatividad general para la pérdida de energía por la emisión de ondas gravitacionales. Este descubrimiento les valió a Hulse y Taylor el premio Nobel de física en el año 1993 "por el descubrimiento de un nuevo tipo de pulsar, un descubrimiento que ha abierto nuevas posibilidades para el estudio de la gravitación" [6]. Esta primera observación de ondas gravitacionales impulsó de forma significativa los intentos por detectarlas de forma directa aunque los experimentos con tal fin ya habían comenzado desde la década de los 60 [7].

Cabe preguntar dónde, cuándo y cómo buscar estos eventos y cómo medirlos. Esperar a que un sistema como el de Hulse-Taylor esté en una órbita de colisión tardaría millones de años. Otros eventos de este tipo se calcula que ocurren en nuestra Galaxia una vez cada 10 000 años. Había entonces que pensar en buscar uno a distancias más lejanas, por ejemplo en el Cluster de Virgo, donde un evento de ese tipo ocurre una vez cada 50 años. No obstante las amplitudes que se detectarían en la Tierra serían del orden de 10^{-21} , por lo que se necesitarían detectores muy sensibles. A manera de ejemplo, para detectar estas amplitudes tomando como L la distancia de la Tierra al Sol necesitaríamos medir variaciones ΔL , del orden de un diámetro atómico.

El mayor impulso en la creación de detectores se logra a partir de la última década del siglo pasado basados en técnicas de interferometría laser. A este último tipo de detectores

pertenece LIGO (Laser Interferometer Gravitational-Wave Observatory, por sus siglas en inglés), construido en los Estados Unidos, y LIGO Avanzado (una versión más refinada de LIGO que aún está por alcanzar su máxima sensibilidad).

Este observatorio de ondas gravitacionales fue el primero en detectar una onda gravitacional (GW150914), confirmando así una de las predicciones de la teoría de la relatividad general de Einstein y abriendo un nuevo camino hacia la comprensión del universo.

Junto a LIGO, también se construyeron los observatorios Virgo en Italia, TAMA 300 (brazos de 300 m) en Japón y GEO 600 (brazos de 600 m) en Alemania; todos estos instrumentos están basados en la técnica de interferometría laser. Ellos constituyen una red global para la detección y análisis de ondas gravitacionales.

En paralelo con el desarrollo de instrumentos cada vez más sensibles, se fueron creando técnicas de relatividad numérica que han permitido comprender de manera teórica la física de los sistemas que emiten ondas gravitacionales como sistemas binarios de agujeros negros y de estrellas de neutrones [8,9]. Las simulaciones que se llevan a cabo en supercomputadoras son un factor clave en el análisis de las señales captadas por los instrumentos.

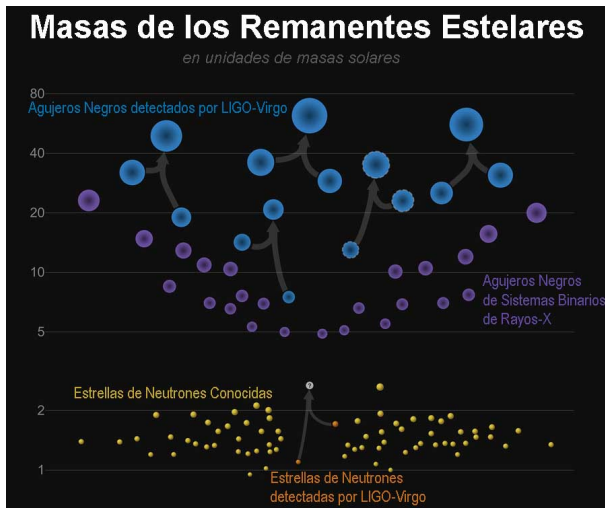


Figura 3. Masas de los remanentes estelares. En color púrpura las masas de los agujeros negros detectados a través de observaciones electromagnéticas; los agujeros negros medidos por ondas gravitacionales (azul); estrellas de neutrones medidas por observaciones electromagnéticas (amarillo); y las masas de las estrellas de neutrones que colisionaron en el evento GW170817, las cuales fueron detectadas a través de ondas gravitacionales (anaranjado). El remanente de GW170817 todavía no se ha clasificado por lo que se denota con un signo de interrogación. Crédito de la imagen: LIGO-Virgo/Frank Elavsky/Northwestern University.

Hasta la fecha se han detectado 5 señales de ondas gravitacionales denominadas: GW150914, LVT151012, GW151226, GW170104, GW170814 y GW170817, donde la nomenclatura es GW (*gravitational wave*) seguido por la fecha de detección con el formato aa/mm/dd, a excepción de la segunda señal que comienza con LVT (LIGO-Virgo Trigger) seguido por la fecha en el mismo formato. LVT151012, aunque disparó las alarmas de los detectores,

no es tan confiable como para considerarse una onda gravitacional (GW). En la Figura 3 se muestran las 4 ondas detectadas compatibles con la colisión de agujeros negros. La quinta señal detectada es sustancialmente diferente pues corresponde a la colisión de dos estrellas de neutrones, lo cual fue anunciado el 16 de octubre del 2017.

III. EL DETECTOR LIGO

El detector LIGO es un interferómetro de Michelson modificado, que consta de dos observatorios, ubicados en Handford (Washington) y Livingstone (Luisiana), Estados Unidos. La necesidad de dos observatorios se justifica porque permite distinguir la señal de la onda gravitacional del ruido local producido por el medio ambiente o propio del instrumento, además de proporcionar un medio para localizar la fuente en el cielo y medir la polarización de la onda.

En la Figura 4 mostramos un diagrama del diseño de LIGO. En él podemos notar que el detector cuenta con dos brazos perpendiculares de longitudes $L_x = L_y = L = 4$ km. En cada uno de estos brazos hay dos espejos que actúan como masas de prueba. Cuando pasa una onda gravitacional, se alteran las distancias entre los espejos de forma tal que la diferencia medida es $\Delta L = \delta L_x - \delta L_y$. Esta diferencia de longitud altera la diferencia de fase entre los haces luminosos que llegan al divisor de haz, de manera que transmite al fotodetector de salida una señal óptica proporcional a la deformación producida por la onda gravitacional.

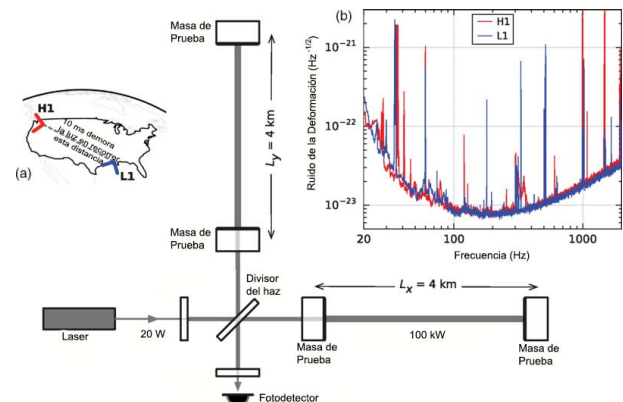


Figura 4. Diagrama del detector LIGO. Una onda gravitacional linealmente polarizada que se propague en el plano ortogonal al detector va a tener el efecto de alargar un brazo y acortar el otro durante medio ciclo de la onda y durante el otro medio ciclo va a hacer el efecto contrario. El fotodetector de salida va a registrar estos cambios de longitud. Mientras que la respuesta del detector es máxima para el caso anteriormente descrito, es significativa para la mayoría de los otros posibles ángulos de incidencia y polarizaciones. En (a) se muestra la localización y orientación de los detectores de LIGO en Handford (H1) y en Livingstone (L1). En (b) se muestra el ruido del instrumento para cada detector en un tiempo cercano al tiempo de la detección, este ruido es una amplitud de densidad espectral expresado en forma que equivalga a la amplitud de la deformación provocada por la onda gravitacional. [3].

La tecnología refinadísima de LIGO ha permitido que este detector alcance sensibilidades del orden de 10^{-18} m, es decir, mide distorsiones de la distancia de los espejos o masas de

prueba del orden de una milésima del diámetro del protón en el rango de frecuencias entre 100 y 300 Hz. Luego, con brazos de 4 km se pueden medir amplitudes de ondas de $h \sim 10^{-21}$.

Siendo tan sensible, LIGO siempre está detectando señales a todas las frecuencias porque las distancias entre los espejos están cambiando constantemente. Durante años los investigadores del experimento hicieron corridas del mismo detectando el origen del ruido, reconociéndolo y también intentando mejorar el detector para disminuirlo. No obstante sobreviven tres ruidos bien caracterizados: el ruido sísmico de la Tierra transmitiéndose a los espejos, el ruido Browniano debido a la vibración de los átomos que forman los espejos que están a temperatura ambiente y el ruido cuántico, el haz de luz proviene de un láser pero lo que se mide en el fotodetector son fotones y esta medición tiene la incertidumbre debida al Principio de Heisenberg.

El propósito de LIGO Avanzado, que comenzó en el 2015 es mejorar la sensibilidad del detector disminuyendo estos tres tipos de ruidos, mejorando el aislamiento sísmico, disminuyendo el movimiento browniano por técnicas en las que haya menos disipación de energía y utilizando un láser de mayor potencia, que emita más fotones y disminuya la incertidumbre de Heisenberg en la medición de los mismos.

De ahí que la medición de las ondas gravitacionales sea muestra de la impresionante perseverancia en la construcción de una robusta y sofisticada técnica por un equipo de eminentes físicos experimentales, teóricos e ingenieros.

Otro proyecto es LISA (Laser Interferometer Space Antenna). Tan antiguo como LIGO, consiste en colocar 3 satélites en órbita alrededor del Sol con láseres viajando entre los satélites. LISA tendría la ventaja de que examinaría otros sistemas distintos a los accesibles por LIGO. En el 2015 una avanzada de dicho proyecto, *LISA Pathfinder* fue lanzado con acierto. Este observatorio no tendría que lidiar, por ejemplo, con el ruido sísmico, pero necesitaría resolver otros muchos problemas técnicos. Por ejemplo, habría que discriminar la señal de onda gravitacional del ruido gravitacional producido por la interferencia de ondas gravitacionales debidas a diferentes fuentes tales como sistemas binarios de Enanas Blancas que se encuentran en nuestra Galaxia. Se prevé que este proyecto comience en el 2034 financiado por la Unión Europea. Sin embargo hay optimismo en la comunidad científica de que pudiera empezar antes debido a las alentadoras 5 señales de ondas ya obtenidas.

IV. LA SEÑAL GW150914

La señal GW150914 es la primera onda gravitacional captada de forma directa. Fue detectada solamente por el observatorio de ondas gravitacionales LIGO. En el momento de la detección, el detector Virgo estaba siendo mejorado y GEO 600 no se encontraba en modo de observación. En la Figura 5 mostramos las características de la onda gravitacional detectada por los dos observatorios de LIGO.

¿Con qué era compatible esta señal? Las simulaciones de relatividad numérica comparadas con las señal medida por

LIGO mostraron que esta era compatible con la colisión de dos agujeros negros de masas iniciales $36^{+5}_{-4} M_{\odot}$ y $29^{+4}_{-4} M_{\odot}$ respectivamente, la masa del agujero negro final era de $62^{+4}_{-4} M_{\odot}$. Esto implicaba que en la colisión se perdió una energía de $3.0^{+0.5}_{-0.5} M_{\odot} c^2$ que fue radiada en forma de ondas gravitacionales [10]. La colisión de los agujeros negros ocurrió a una distancia de 1.3 billones de años luz.

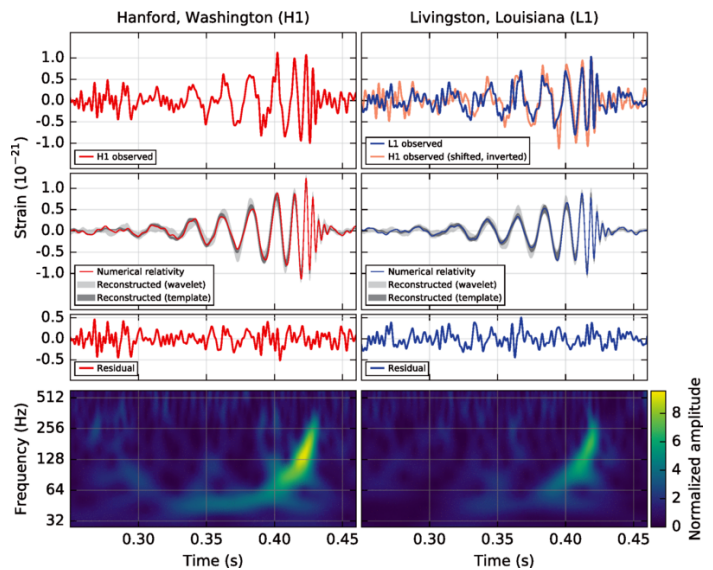


Figura 5. En la columna izquierda se muestra la señal detectada por los detectores del observatorio LIGO Handford (H1) y en la columna derecha por el observatorio LIGO Livingston (L1). En la fila de arriba a la izquierda se muestra la deformación en H1 y a la derecha la deformación en L1. GW150914 llega primero a L1 y $6.9^{+0.5}_{-0.4}$ ms más tarde a H1, para la comparación visual, los datos obtenidos por H1 también se muestran corridos en el tiempo en esta cantidad e invertidos. En la segunda fila se muestra la deformación de la onda gravitacional proyectada sobre cada detector en la banda de frecuencias entre 35 – 350 Hz. Las líneas sólidas corresponden a la forma de una onda obtenida mediante simulaciones de relatividad numérica. Las áreas sombreadas muestran regiones con un 90 % de credibilidad para dos reconstrucciones de la forma de la onda. La gris oscura es un modelo de la señal con una plantilla de la forma de la onda basada en un sistema binario de agujeros negros. La gris clara no usa ningún modelo astrofísico, si no que se calcula la señal de deformación como una combinación lineal de Guasianas-seno wavelets. Estas reconstrucciones se superponen en un 94 %. En la tercera fila, se muestran los residuales luego de sustraer la forma de onda filtrada obtenida mediante la relatividad numérica de la obtenida por las series temporales filtradas del detector. En la última fila se muestra una representación en tiempo-frecuencia de los datos de deformación, donde se puede observar que la señal de frecuencia aumenta al transcurrir el tiempo. Crédito de la figura: [3].

V. LA SEÑAL GW170817

El pasado 16 de octubre del 2017 nos sorprendió el anuncio de la primera detección de una onda gravitacional proveniente de la colisión de dos estrellas de neutrones [11, 12]. En la Figura 7 se muestra una representación artística de este evento.

La relevancia de esta detección está en que constituye el primer evento cósmico detectado tanto en ondas electromagnéticas como gravitacionales. La señal fue detectada primeramente por LIGO. Luego los datos obtenidos fueron analizados tanto por los programas de LIGO como los de Virgo. Por otro lado de forma casi

simultánea se observó una emisión de rayos gamma por el telescopio espacial Fermi de la NASA. Esto hizo que se activaran protocolos de seguimiento de la región del cielo de donde provenía la señal para telescopios de todo el mundo. En la Figura 6 se muestra un mapa de la distribución de los casi 70 telescopios y observatorios tanto en la tierra como en el espacio que siguieron la evolución de la señal.

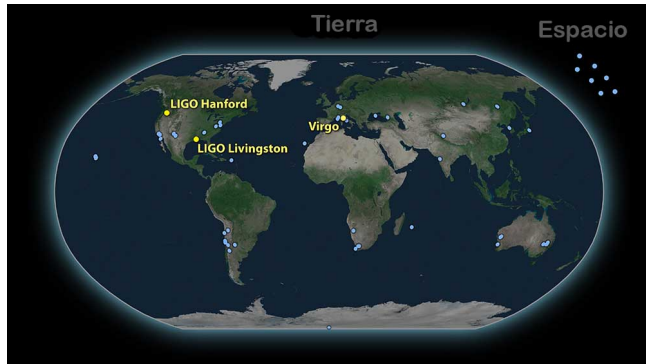


Figura 6. Mapa de los aproximadamente 70 observatorios que detectaron el evento de ondas gravitacionales llamado GW170817. El 17 de agosto, los observatorios de ondas gravitacionales LIGO y Virgo detectaron ondas gravitacionales producidas por la colisión de dos estrellas de neutrones. Los telescopios ópticos alrededor del mundo pudieron observar las radiaciones luminosas emitidas por este evento en diferentes longitudes de onda. Crédito de la imagen: LIGO-Virgo

Una característica peculiar de esta señal y que la diferenció inmediatamente de las captadas anteriormente fue su duración. Las señales anteriores duraron aproximadamente una fracción de segundo, mientras que esta señal duró alrededor de 100 segundos, lo cual fue determinante para reducir las incertidumbres en la localización de la fuente [13]. Los análisis de la forma de la señal también mostraron que se correspondía con la colisión de objetos menos masivos que los anteriores. Las masas fueron estimadas en $1.1 M_{\odot}$ y $1.6 M_{\odot}$, lo que los hace compatible con las masas de estrellas de neutrones. Además, estudiando la amplitud de la señal se pudo determinar la distancia aproximada de la fuente en unos 130 millones de años luz con un 30% de margen de error, por tanto este evento ocurrió a una distancia mas cercana a la Tierra que el de la colisión de agujeros negros.

Los modelos teóricos ya habían predicho que la colisión de dos estrellas de neutrones debían emitir ondas gravitacionales y rayos gamma así como una cantidad considerable de otras emisiones en forma de jets en todas las bandas del espectro electromagnético, con lo cual esta observación viene a validar por primera vez dichas predicciones teóricas.

Los rayos gamma emitidos fueron en forma de destellos cortos (*short gamma ray bursts*, como se les conoce en Inglés). Se ha llamado a dicha emisión GRB170817A. Esta observación permitió resolver uno de los grandes enigmas de la astrofísica de altas energías que era precisamente de dónde provenía este tipo de radiación. La observación de la señal GW170817 seguida a los dos segundos por rayos gamma, permitió comprobar también que las ondas gravitacionales

viajan a la velocidad de la luz.

Con la colisión de estas estrellas neutrónicas se pudo probar por primera vez la hipótesis de la aparición de una kilonova, 1000 veces mas brillante que una Nova y su relación con el importante hallazgo de oro y platino. Esta detección ha servido para confirmar las teorías que relacionaban el origen de los elementos pesados de la tabla periódica con estos convulsos eventos. Son los metales preciosos polvo de estrellas de neutrones [14].

Por otro lado, la observación ha proporcionado una nueva forma de medir la constante de Hubble, que no es más que la razón de expansión del universo como una función de la distancia desde la Tierra. Esta medición se puede realizar porque conociendo la amplitud y polarización de la onda gravitacional, es posible determinar la distancia hasta la fuente. Como también para ese caso se observó la galaxia de origen, se pudo encontrar el corrimiento al rojo de su luz y por tanto la velocidad a la cual esta se aleja de la Tierra. Basándose en estas mediciones, se encontró la constante de Hubble, la cual concuerda con mediciones realizadas anteriormente con otras técnicas [15].

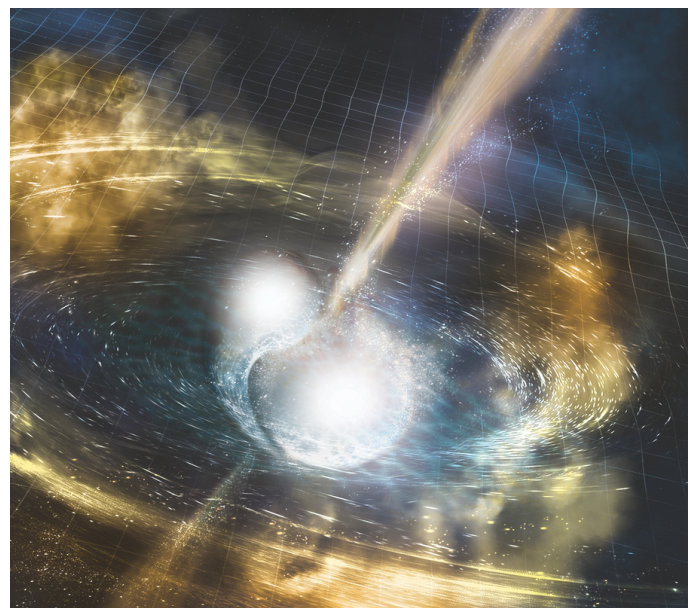


Figura 7. Ilustración artística de la colisión de dos estrellas de neutrones. Se muestran las ondas gravitacionales como deformaciones del espacio-tiempo que viajan a partir de la colisión, mientras que los haces estrechos son el destello de rayos gamma que salen justamente pocos segundos después de las ondas gravitacionales. También se representan las nubes de materiales expulsados por la colisión. Estas nubes brillan en la región del espectro visible y en otras longitudes de onda de luz. Crédito de la imagen: NSF/LIGO/Sonoma State University/A. Simonnet.

Aunque la señal fue detectada por LIGO, Virgo jugó un papel fundamental, ya que gracias a este detector se pudo triangular la localización de la fuente en una región pequeña del cielo, lo cual permitió que los demás observatorios supieran a donde apuntar sus telescopios para estudiar la señal en todas las bandas del espectro electromagnético. Con ello se ha abierto una nueva ventana a la observación del universo.

VI. EL NOBEL

Este octubre de 2017, dos años más tarde de la primera detección de ondas gravitacionales en la Tierra, se ha anunciado que se les coronó con el Premio Nobel de Física a tres físicos norteamericanos, Rainer Weiss, Barry C. Barish y Kip S. Thorne “por su decisiva contribución al detector LIGO y a la observación de ondas gravitacionales” [16] (ver Figura 8).



Figura 8. Ganadores del premio Nobel de Física del año 2017: Una mitad para Rainer Weiss y la otra mitad fue dividida entre Barry C. Barish y Kip S. Thorne. Crédito de la imagen: ©Nobel Media. Ill. N. Elmehe

Rainer Weiss, es profesor emérito de física en el MIT. Su contribución principal al descubrimiento fue la invención y desarrollo de la técnica de interferometría láser [17], por cuarenta años ha estado involucrado en este tipo de técnica para buscar las ondas gravitacionales. Por su parte Kip Stephen Thorne, es uno de los mayores expertos mundiales en las aplicaciones a la astrofísica de la Teoría de la Relatividad General. Fue uno de los cofundadores en 1984 del proyecto LIGO y sus aportes teóricos han sido decisivos para la identificación y el análisis de las señales detectadas [18]. Barry C. Barish, es profesor emérito en la Cátedra Ronald y Maxine Linde de física del Instituto de Tecnología de California. Se convirtió en investigador principal de LIGO en 1994 y en director del proyecto en 1997. Es el creador de la Colaboración Científica LIGO que en la actualidad agrupa a más de 1000 científicos de todo el mundo [19].

A pesar de ser más que merecido el Premio Nobel para estos físicos, es justo decir que detrás de esta hazaña está también el trabajo invaluable, entusiasta y creativo de miles de físicos e ingenieros que garantizaron la extraordinaria precisión de estas mediciones así como el análisis minucioso e inequívoco en el procesamiento de los datos obtenidos.

VII. CONCLUSIONES

La detección de ondas gravitacionales de forma directa ha abierto una nueva era en la observación de eventos cósmicos.

Cien años después de su predicción teórica ha sido posible detectarlas en Tierra. Su detección era dudosa debido a lo elusiva que resultaban: se trataba de una señal muy débil. Pero, por otro lado, se trataba de una señal para la cual el Universo es casi transparente debido a su casi inexistente interacción con la materia, de modo que importaba poco de dónde provenía.

Sin embargo, gracias al ingenio y la tenaz persistencia de muchos físicos que diseñaron un sofisticadísimo sistema de

detección con el cual se miden distorsiones de distancias entre masas del orden de una milésima del tamaño de un protón, tenemos hoy la evidencia de lo predicho por Einstein.

La red de detectores que se está conformando a nivel global va a permitir realizar estudios cada vez más completos sobre eventos que antes eran inaccesibles a la observación y abre una era de exploración del Universo en una banda de frecuencias nunca antes explorada. La exactitud de estas observaciones impulsarán el estudio de muchos eventos astrofísicos y cosmológicos que aguardan por explicación. Ha comenzado una era en la que el “sonido” del espacio-tiempo y los cataclísmicos eventos que generan objetos astrofísicos nos está siendo revelado.

Mucha tecnología desarrollada en estos experimentos se transfiere a la vida diaria, así que además de saciar nuestra curiosidad por las señales del Universo, tendremos repercusión en la industria y la tecnología gracias a todo lo desarrollado por LIGO y los otros experimentos.

AGRADECIMIENTOS

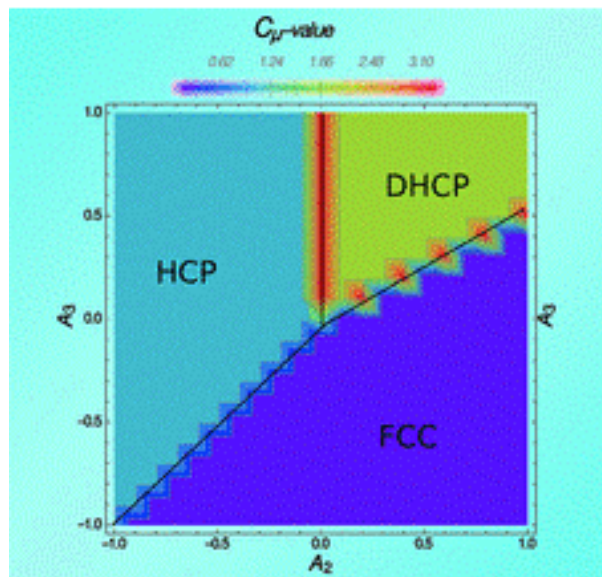
Los autores agradecen a Diana Alvear, Hugo Pérez y Gretel Quintero sus comentarios y sugerencias a este manuscrito. D.M.P. y A.P.M. han recibido el apoyo del proyecto CB0407 del CITMA y reconocen haber recibido la ayuda del Centro Internacional Abdus Salam de Física Teórica, Trieste, Italia. D.M.P. también ha sido apoyado por una beca DGAPA-UNAM.

REFERENCIAS

- [1] A. Einstein, Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss. Berlin (Math. Phys.). 1916, 688 (1916).
- [2] A. Einstein, Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss. Berlin (Math. Phys.). 1918, 154 (1918).
- [3] B.P. Abbott, R. Abbott, T.D. Abbott, M.R. Abernathy, F. Acernese, K. Ackley, C. Adams, T. Adams, P. Addesso, R.X. Adhikari *et al.*, Phys. Rev. Lett. 116, 061102 (2016).
- [4] W.R. Johnston, <http://www.johnstonsarchive.net/relativity/pictures.html>, [Online; accessed 24-October-2017].
- [5] R.A. Hulse, J.H. Taylor, ApJL. 195, L51 (1975).
- [6] Nobel Foundation, <http://www.nobelprize.org/nobel-prizes/physics/laureates/1993/index.html>.
- [7] J. Weber, J. Phys. Rev. 117, 306 (1960).
- [8] L. Lehner, F. Pretorius, Ann. Rev. Astron. Astrophys. 52, 661 (2014).
- [9] U. Sperhake, Quantum Grav. 32, 124011 (2015).
- [10] B.P. Abbott, R. Abbott, T.D. Abbott, M.R. Abernathy, F. Acernese, K. Ackley, C. Adams, T. Adams, P. Addesso, R.X. Adhikari, *et al.* Phys. Rev. Lett. 116, 241102 (2016).
- [11] B.P. Abbott, R. Abbott, T.D. Abbott, F. Acernese, K. Ackley, C. Adams, T. Adams, P. Addesso, R.X. Adhikari, V.B. Adya, *et al.* Phys. Rev. Lett. 119, 161101 (2017).
- [12] Collaboration, Astrophys. J. 848, L12 (2017).

- [13] H. Johnston, <http://physicsworld.com/cws/article/news/2017/oct/16/spectacular-collision-of-two-neutron-stars-observed-for-first-tim> [Online; accessed 24-October-2017].
- [14] The LIGO Scientific Collaboration, the Virgo Collaboration, B.P. Abbott, R. Abbott, T.D. Abbott, F. Acernese, K. Ackley, C. Adams, T. Adams, P. Addesso, *et al.* ArXiv e-prints 1710.05836 (2017).
- [15] LIGO/Virgo, <http://www.ligo.org/science/Publication-GW170817Hubble/index.php> [Online; accessed 24-October -2017].
- [16] Nobel Foundation, http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2017.
- [17] Wikipedia, https://en.wikipedia.org/wiki/Rainer_Weiss, [Online; accessed 24-October-2017].
- [18] Wikipedia, https://en.wikipedia.org/wiki/Kip_Thorne, [Online; accessed 24-October-2017].
- [19] Wikipedia, https://en.wikipedia.org/wiki/Barry_Barish, [Online; accessed 24-October-2017].

FÍSICOS CUBANOS SE APROPIAN DE LA PORTADA DE ACTA CRYSTALLOGRAPHICA



Portada de Acta Crystallographica basada en el artículo de la autoría de físicos cubanos: "Close-packed structure dynamics with finite-range interaction: computational mechanics with individual layer interaction".

Se trata del artículo "Close-packed structure dynamics with finite-range interaction: computational mechanics with individual layer interaction", de la autoría de E.

Rodríguez-Horta, E. Estevez-Rams, R. Lora-Serrano y R. Neder; los dos primeros profesores de la Facultad de Física de la UH (Rodríguez-Horta et al. Acta Cryst. A73, 377-386, (2017)).

La portada de la revista (ilustración mostrada en la figura) es descrita, textualmente, de la siguiente forma: "The field of computational mechanics allows order and disorder in crystallography to be treated on an equal footing. Ordering is viewed as an information-processing dynamic capable of storing, transmitting and processing information. Statistical complexity, a measure of the resources used by the computational system, is plotted as function of the interaction parameters in a finite-range model describing polytypism in close-packed structures. Interaction is taken to occur between actual layers of the stacking arrangement. [Rodríguez-Horta et al. (2017). Acta Cryst. A73, 377-386]".

Acta Crystallographica Section A, publica artículos sobre las novedades en los estudios teóricos y experimentales de todas las áreas de la cristalografía en el sentido más amplio. Tuvo en 2016 un Factor de Impacto de 5.725 y reporta un factor de impacto de 5 años de 3.505.

Beatriz Concepción-Rosabal
IMRE, Universidad de La Habana

VARADERO UNDER THE MICROSCOPE

The Cuban Society of Microscopy Organized the XIV Interamerican Congress on Microscopy (CIASEM 2017) from September 25 to 29 in the Hotel Meliá Marina Varadero. This was the second time that Cuban Society for Microscopy organizes a CIASEM congress. The previous was held at 2005 at the National Hotel in Havana.

CIASEM congresses are held every two years, and are the most important meetings dealing with Microscopy through the American continent. They are sponsored by the Interamerican Committee of Societies for Microscopy (CIASEM), a regional organization of the International Federation of Societies for Microscopy (IFSM).

Following the approach of previous CIASEM congresses, CIASEM 2017 included simultaneous sessions in the areas of Materials Science, Life Sciences, Advances in Instrumentation and Teaching of Morphological Sciences. Five pre-congress courses updating on various topics of microscopy and a micrograph contest were also scheduled.

Prestigious researchers from different latitudes gave eighteen lectures that updated the state of the art in microscopy. There were a total of 273 participants, where Cuba (92), Mexico (62), Brasil (25), Argentina (21), Colombia (15) and the US (11) were the nations best represented. Fifteen students and young researchers attended CIASEM 2017 thanks to scholarships provided by the International Federation of Microscopy (IFSM) and the Microscopy Society of America (MSA).

Accepted abstracts will be published in Acta Microscopica, Vol. 26, Supp. A, 2017. All participants of CIASEM 2017, whose abstracts have been accepted for oral or poster presentation, can send their manuscripts "in extenso" to Acta Microscopica, which will be published in a special issue of the journal.

The Organizing Committee,
CIAEM 2017

MEDICIONES PARA UN DESARROLLO SOSTENIBLE

Del 27 al 29 de septiembre de 2017 se desarrolló en La Habana el Décimo Simposio Internacional Metrología 2017 bajo el lema “Mediciones para un desarrollo sostenible”. Más de 400 delegados de 11 países se dieron cita en el Simposio, que contó con la presencia de personalidades de la Metrología internacional, tales como Stephen Patoray, Presidente del Comité Internacional de Metrología Legal, Andy Henson, Director de Relaciones Internacionales y Colaboración del Buró Internacional de Pesas y Medidas y Héctor Laiz, Presidente del Sistema Interamericano de Metrología.

El evento estuvo precedido por dos cursos para especialistas de las ramas priorizadas del país, los que recibieron información actualizada acerca de las novedades del Sistema Internacional de Unidades y los aspectos fundamentales que estarán contenidos en la nueva versión de la norma internacional ISO 17025 sobre requisitos para la competencia técnica de los laboratorios de calibración y ensayo.

En el Simposio se impartieron conferencias magistrales que permitieron conocer el estado actual de la Metrología mundial. Las presentaciones orales abarcaron la formación y

capacitación de recursos humanos en materia de Metrología, el desarrollo de equipos y métodos de medición, la realización de ensayos de aptitud, la creación de patrones de medición, la estimación de la incertidumbre de la medición, la garantía de la trazabilidad metrológica, la validación de técnicas analíticas con herramientas estadísticas, así como las mediciones para el control y vigilancia de parámetros ambientales. También estuvo presente el aseguramiento metrológico a la industria farmacéutica, el transporte aéreo, los servicios aeroportuarios y la producción agroalimentaria. Por último, se realizaron dos talleres temáticos, uno sobre Volumen y Flujo, dedicado a las mediciones en la industria petrolera, y otro sobre Metrología Legal, que prestó atención a los productos pre-empacados y la organización de los sistemas de control metrológico legal en los países participantes.

MCs. Alejandra R. Hernández-Leonard,
Instituto Nacional de Investigaciones en Metrología

EL CLAF IMPULSA LA OLUF



Trigesimo octava reunión del Centro Latinoamericano de Física (San José, Costa Rica, 17 de noviembre de 2017). En la pantalla, al fondo, aparece la Presidenta de la Sociedad Cubana de Física. Presidiendo la mesa, al fondo, el cubano Carlos Trallero-Giner, presidente del CLAF.

El pasado 17 de noviembre tuvo lugar la trigésimo octava reunión del Consejo Directivo del CLAF en San José, Costa Rica. En la reunión participaron como invitados el director del Centro Internacional de Física Teórica de Trieste (ICTP) Dr. Fernando Quevedo Rodríguez y el presidente de la Federación Iberoamericana de Sociedades de Física (FEIASOFI) Dr. José Antonio Ramírez Pastor. Entre otros temas, se acordó felicitar a Cuba por la realización de la

primera Olimpiada Universitaria de Física (OLUF) en marzo de 2017, y asignar un presupuesto de 1000 USD anuales para su organización. Cuba participó por videoconferencia en la reunión.

María Sánchez-Colina (*Presidenta, SCF*)
Ernesto Altshuler



Conferencistas del First Workshop UCI-ICS and short Course on Computational Soft Matter (UCI, 16-17 noviembre, 2017). Al centro, con camisa clara de mangas largas, el Dr. R. Winkler. A su izquierda, cerca de la pared, el Dr. J. Gulín y a su derecha, el MSc. A. Martín—Gómez. A la derecha de éste último, E. Navas.

En el marco de la (UCI) fue desarrollado del 16 al 17 de Noviembre el Primer Taller UCI-ICS y Curso Corto de Métodos Computacionales en Materia Suave (First Workshop UCI-ICS and short Course on Computational Soft Matter en Inglés). El evento fue financiado por la Fundación Alexander von Humboldt como parte de un proyecto conjunto de vínculo científico entre la UCI y el Instituto de Sistemas Complejos y Simulaciones Avanzadas ICS-2/IAS-2 del Forschungszentrum Jülich de Alemania (ICS).

El comité organizador estuvo compuesto por el Profesor Dr. Jorge Gulín González de la UCI, el Profesor Dr. Roland Georg Winkler del ICS y el estudiante de doctorado Edisel Navas Conyedo de la UCI.

Las temáticas del evento se enfocaron a la aplicación de Métodos Computacionales en Materia Suave (Computacional Soft Matter en Inglés), Bioinformática y Computación de Altas Presentaciones (HPC por sus siglas en Inglés).

Se impartieron por parte del Profesor Dr. Roland Georg Winkler y su estudiante de doctorado MSc. Aitor Martín Gómez, ambos del ICS, cuatro cursos cortos:

- Hydrodynamic Interactions and Mesoscale Simulations — The Multiparticle Collision Dynamics Approach.

- Implementation of the Multiparticle Collision Dynamics Approach.
- Transport in microchannels.
- Mesoscale Hydrodynamic Simulations of Active Systems.

Se presentaron doce trabajos cuya composición se corresponde con uno de la UH, uno de BIOCUBAFARMA, uno del CIGB, uno de la UCLV y ocho de la UCI. Participaron entre ponentes, conferencistas e invitados un total de treinta personas. Tres trabajos fueron seleccionados para su publicación en la Revista Cubana de Ciencias Informáticas.

Se consolidaron las relaciones de trabajo y colaboración entre la UCI y ICS-2/IAS-2 del Forschungszentrum Jülich de Alemania, con la posibilidad de establecer nuevos proyectos con la participación de otras instituciones cubanas.

Entre las actividades científicas previas al evento se realizó un seminario del Profesor Dr. Roland Georg Winkler en la Facultad de Física de la Universidad de la Habana (FF-UH) e intercambio con investigadores, profesores y estudiantes en la FF-UH y la UCI.

Comité Organizador del Evento

ÁNGEL GILBERTO AUGIER CALDERÍN (6 DE ENERO DE 1947 - 19 DE JUNIO DE 2017)

Con la inesperada desaparición física del Dr. C. Ángel G. Augier Calderín (Angelito, como cariñosamente le conocimos) la Óptica en Cuba pierde a uno de sus más destacados exponentes.



Ángel Gilberto Augier Calderín (1947-2017).

Graduado de licenciatura en Física en la Universidad de La Habana, culminó en 1980 sus estudios de doctorado en Ciencias Físico-Matemáticas en el Instituto A. F. Ioffe de San Petersburgo (antiguo Leningrado), Federación Rusa, realizando más tarde estudios postdoctorales en Cuba y en el extranjero.

Durante su etapa de investigador en la CUJAE (hoy Universidad Tecnológica de La Habana "José Antonio Echeverría") entre 1973 y 2001, propuso y dirigió el diseño metodológico y la organización de los primeros cursos para especialistas de Óptica, Láser y Óptica Coherente. Fue, además, presidente del Comité Académico de la maestría en Óptica y Láser ofrecida por el departamento de Física de esta institución fungiendo también como miembro del comité académico de la maestría en de Procesamiento, Almacenamiento y Transmisión de señales (PATSI).

Desde el año 2001 hasta su fallecimiento, continuó compartiendo sus experiencias como docente e investigador en el Instituto Superior de Ciencias y Tecnología Nucleares (hoy Instituto Superior de Ciencia y Tecnología Aplicadas, InsTEC).

Desarrolló investigaciones en óptica coherente, e impartió cursos de pregrado en diversas asignaturas tales como Física General, Óptica, Geometría Analítica, Análisis Matemático, Funciones de Variable Compleja, Ecuaciones de la Física Matemática, así como Holografía, Óptica de Fourier y Procesamiento de Imágenes y Señales en posgrado,

contribuyendo a la formación de ingenieros y profesores como investigadores.

Dirigió diferentes proyectos de investigaciones en el área de la Óptica y fue autor de más de 80 publicaciones en libros, revistas científicas y conferencias arbitradas. Obtuvo cuatro certificados de invención y más de 20 informes internos de investigación, participando en más de 50 eventos de carácter internacional. Dedicó en los últimos años ingentes esfuerzos a la organización del Congreso Internacional de Óptica, Fotónica y Fotociencias (CIOFF), cuyos resúmenes publicó la Revista Cubana de Física, y colaboró con la organización de otros congresos especializados en óptica, gracias a su liderazgo y reconocimiento internacional en esta rama de la Física. Todo ello tuvo lugar sobreponiéndose, con ejemplar actitud e inquebrantable entusiasmo, a diversos problemas de salud que le aquejaban desde hacía varios años.

Durante su rica trayectoria como científico, fue tutor de tesis de doctorado y maestría, y consultor de más de 200 proyectos de tesis. Participó activamente en proyectos de colaboración con prestigiosas instituciones extranjeras como la universidad francesa Paris Sud 11, con el Instituto Ioffe, y como invitado del CNRS (Francia) por dos ocasiones: la segunda de estas como co-director de tesis, y como miembro del tribunal para la defensa doctoral. Entre otras responsabilidades académicas y científicas, se desempeñó por varios años como miembro de la Comisión de Grados Científicos de la CUJAE, y posteriormente como asesor metodológico en el INSTEC, así como en numerosos consejos científicos, grupos de expertos y comisiones a distintos niveles nacionales. Fue también miembro del Tribunal de Doctorado de Física desde 1998, presidente del comité territorial cubano de la Comisión Internacional de Óptica (ICO) entre 1998 y 2015, y desde el año 2004 hasta su fallecimiento, fue vicepresidente del Tribunal Nacional Permanente de Física para la defensas de doctorados.

Como miembro de la Sociedad Cubana de Física fue vicepresidente de su Sección de Óptica y Espectroscopia por varios años.

Una muestra de su versatilidad y creatividad incesantes, que no por poco conocida dejará de ser recordada por quienes tuvimos la suerte de apreciarla, son las obras de arte que legó tanto en la escultura como en el arte digital y la literatura para niños. Ello nos que nos habla, de manera inequívoca, de su sensibilidad humana y espíritu emprendedor.

Por su profesionalidad y ejemplar conducta revolucionaria se hizo acreedor de las siguientes condecoraciones:

- Medalla de la Alfabetización
- Medalla conmemorativa 40 aniversario de las Fuerzas Armadas Revolucionarias (1997)

- Distinción por la Educación Cubana, otorgada por el Consejo de Estado de la República de Cuba (1997)
- Medalla Rafael María de Mendive, otorgada por el Sindicato Nacional de Trabajadores de la Educación, la Ciencia y la Cultura, (1998)
- Medalla José Tey otorgada por el Consejo de Estado de la república de Cuba (2002)

Sean pues, estas breves notas sobre su vida y obra, un humilde tributo a su memoria.

Dr. C. Juan A. Alejo Díaz,
Dr. C. Juan José Llovera González,
Universidad Tecnológica de La Habana "José Antonio Echeverría", Cujae.

LUIS ALBERTO DEL PINO MUÑOZ (2 DE NOVIEMBRE DE 1961 - 29 DE OCTUBRE DE 2017)

Luis Alberto del Pino Muñoz nació en Consolación del Sur, Pinar del Río, el 2 de noviembre de 1961. Estudiante precoz y ajedrecista reconocido en las competencias juveniles, ingresó en la Carrera de Física de la Universidad de La Habana en 1979.



Luis Alberto del Pino Muñoz (1961-2017).

Su intuición física era excepcional y su inteligencia admirable, lo que contribuyó a sortear con creces lagunas de su preparación en matemática. El primer semestre bastó para eliminarlas.

Se graduó en 1984. Su tesis de Diploma, sobre la estabilidad de plasmas homogéneos con respecto al rompimiento de simetría cristalino, fue dirigida por uno de nosotros (A.C.), quien se convirtió en mentor y guía. Como su caligrafía era

en extremo complicada, le sugerimos que se dedicara a la Física Computacional.

Una vez graduado, pasó a trabajar a la Universidad de Pinar del Río, donde formó muchísimas generaciones de profesionales.

Amante del Béisbol, seguía la serie nacional con pasión y defendía con vehemencia a su equipo de Pinar del Río. Era un lector voraz, especialmente de Historia.

Comenzando su educación de postgrado, lo atraparon los difíciles años de la década de 1990, pero no abandonó la Física. Finalmente, con mucho esfuerzo, hizo su doctorado en colaboración con la Dra. Ana Laura Benavides en el Instituto de Física de la Universidad de Guanajuato (México), que terminó con honores en el 2002. La tesis trataba sobre la modelación computacional de la física estadística de gases dipolares.

Extraordinariamente familiar, adoraba a sus padres y hermano, y fundó una familia que amaba profundamente. En el 2009 se movió a la Universidad Católica del Norte (Chile), donde se integró al grupo de Física Estadística del Departamento de Física.

Nos sorprendió el 27 de octubre la noticia de que padecía un cáncer de pulmón. El 29 ya no estaba entre nosotros. Cuenta su colega Sergio Curilef hoy día Director del Departamento de Física: “a pesar de su enfermedad, su ánimo en el trabajo no decayó, tanto que lo hizo emprender dos proyectos que están siendo terminados por sus colaboradores y estudiantes. Su calidad como persona lo hizo generar un grupo de amigos en Chile que lo respetaba y admiraba entrañablemente”.

Los que lo conocimos sabemos que perdimos un amigo, un gran físico y un cubano de los pies a cabeza por su invariable bondad y campechano carácter.

Aurora Pérez Martínez y Alejandro Cabo,
Departamento de Física Teórica,
Instituto de Cibernética, Matemática y Física (ICIMAF)

