

FÍSICA

REVISTA CUBANA DE FÍSICA

FÍSICA

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

VOL.35 No.2
DICIEMBRE, 2018



DESPIDIENDO EL 40 ANIVERSARIO
DE LA SOCIEDAD CUBANA DE FÍSICA

Portada: Clausura de las celebraciones por el 40 aniversario de la SCF el 1ro de noviembre de 2018. (ver noticia en página 133) (foto: E. Altshuler)

EDITOR

E. ALTSHULER

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

EDICIÓN ELECTRÓNICA

J. J. GONZÁLEZ, C. GANDARILLA

Facultad de Física, Universidad de la Habana
jjgonzalez@fisica.uh.cu, cgandarilla@fisica.uh.cu

E. MARTÍNEZ

NTNU, Norway
martinez.etien@gmail.com

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

INTEC, La Habana
abatista@intec.cu,

W. BIETENHOLZ

UNAM, México
wolbi@nucleares.unam.mx

G. ROJAS-LORENZO

Instec, La Habana
german@instec.cu

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@electrica.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. RAMÍREZ-MIQUET

HiFiBio Therapeutics, France
eramirez@univ-paris-diderot.fr

T. SHINBROT

Rutgers University
shinbrot@soemail.rutgers.edu

C. A. ZEN-VASCONCELOS

Univ. Federal Rio Grande du Sul
cesarzen@cesarzen.com

COORDENADAS

- 80 **PARA LEVANTAR LA FÍSICA CUBANA: OYENDO A LOS NOBEL**
[TO RAISE THE CUBAN PHYSICS: LISTENING TO THE NOBEL LAUREATES]
E. Altshuler

ARTÍCULOS ORIGINALES

- 82 **STOCHASTIC MODEL OF MOLECULAR DIFFUSION IN OPTICAL LATTICES**
[MODELO ESTOCÁSTICO DE LA DIFUSIÓN MOLECULAR EN REDES ÓPTICAS]
E. E. Torres-Miyares, L. Cruz-Rodríguez, L. Uranga-Piña, A. Martínez-Mesa
- 86 **LOGARITHMIC POTENTIAL BRANeworld IN LIGHT OF THE RECENT EXPERIMENT OBSERVATION**
[“MUNDO BRANA” DE POTENCIAL LOGARÍTMICO A LA LUZ DE LA OBSERVACIÓN EXPERIMENTAL RECIENTE]
M. Ferricha-Alami, O. Jdair, H. Chakir, M. Bennai
- 91 **SPIN-CROSSOVER IN MOLECULAR CRYSTALS: AN ELECTRON-COUPLED LOCAL VIBRATIONS MODEL**
[TRANSICIÓN DE ESPÍN EN CRISTALES MOLECULARES: UN MODELO DE ELECTRONES Y VIBRACIONES LOCALES ACOPLADAS]
C. Rodríguez-Castellanos, Y. Plasencia, E. Reguera
- 97 **GENERACIÓN DE SEGUNDO Y TERCER ARMÓNICO EN NANO-ESTRUCTURAS CON POTENCIAL DE CONFINAMIENTO ASIMÉTRICO: EL PAPEL DE LA APROXIMACIÓN DE ÁTOMO DE DOS NIVELES**
[SECOND-HARMONIC AND THIRD-HARMONIC GENERATION IN NANO-STRUCTURES WITH ASSYMETRIC CONFINEMENT POTENTIAL: THE ROLE OF TWO-LEVEL ATOM APPROXIMATION]
D. Causil, M. Urango-Baquero, A. Portacio
- 102 **CARACTERIZACIÓN DE LA CINÉTICA DEL SECADO SOLAR EN HOJAS DE TILO**
[JUSTICIA PECTORALIS JACQ VAR. PECTORALIS] (CHARACTERIZATION OF SOLAR DRYING KINETIC IN TILE LEAF)
Y. O. Hernández, A. Socorro, S. Calderón, M. Vega
- 108 **THROUGHFLOW AND MAGNETIC FIELD EFFECTS ON THE ONSET OF CONVECTION IN A HELE-SHAW CELL**
[EFECTOS DEL FLUJO Y EL CAMPO MAGNÉTICO SOBRE EL COMIENZO DE LA CONVECCIÓN EN UNA CELDA DE HELE-SHAW]
D. Yadav
- 115 **EFFECTO DEL CAMPO MAGNÉTICO SOBRE EL ESPECTRO DE EMISIÓN PARA UN SISTEMA MICROCAVIDAD-PUNTO CUÁNTICO**
[MAGNETIC FIELD EFFECT ON THE SPECTRUM OF A MICROCAVITY-QUANTUM DOT SYSTEM]
L. E. Cano, P. S. S. Guimarães, A. Portacio
- COMUNICACIONES ORIGINALES**
- 118 **INTEGRACIÓN DE HARDWARE LIBRE COMO HERRAMIENTA EDUCATIVA PARA INVESTIGAR LA RESPUESTA EN EL TIEMPO DEL CIRCUITO RLC EN SERIE**
[INTEGRATING FREE OPEN SOURCE HARDWARE AS EDUCATIONAL TOOL TO INVESTIGATE THE RLC CIRCUIT TIME RESPONSE]
E. Serrano-Pérez
- PARA FÍSICOS Y NO FÍSICOS**
- 121 **NOBEL PRIZE IN PHYSICS 2018 AWARDED "FOR GROUNDBREAKING INVENTIONS IN THE FIELD OF LASER PHYSICS"**
[PREMIO NOBEL DE FÍSICA OTORGADO "POR INVENCIÓNES INNOVADORAS EN EL CAMPO DE LA FÍSICA LÁSER"]
G. -P Galaup
- 128 **THE APPLICATION OF NUCLEAR PHYSICS IN BIOLOGY AND MEDICINE**
[LA APLICACIÓN DE LA FÍSICA NUCLEAR EN BIOLOGÍA Y MEDICINA]
I. Korsun

133 **NUESTRA FÍSICA EN NOTICIAS**

OBITUARIOS

- 136 **G. DELGADO-BARRIO (9 ABRIL 1946 – 26 JUL 2018)**
J. Rubayo Soneiral
- 138 **L. LEDERMAN (JULY 15, 1922 – OCTOBER 3, 2018)**
E. Altshuler
- 139 **L. S. DURÁN-ALFONSO (30 AGOSTO, 1948 – 28 SEPTIEMBRE 2018)**
C. Díaz-Águila

PARA LEVANTAR LA FÍSICA CUBANA: OYENDO A LOS NOBEL

TO RAISE THE CUBAN PHYSICS: LISTENING TO THE NOBEL LAUREATES

E. ALTSHULER

Editor, Revista Cubana de Física

¿Qué opinión le merece la reducción del tiempo de las carreras universitarias, según el Plan de Bologna? –preguntó a quemarropa nuestro profesor Carlos Rodríguez-Castellanos al premio Nobel de Física Klaus von Klitzing. El colega alemán dio una respuesta contundente, que reproduzco aquí de forma aproximada: “Ha sido un fracaso en Europa: los egresados se ven obligados a ir de vuelta a la Universidad a hacer maestrías, pues no encuentran trabajo como físicos. De hecho, creo que la carrera de Física debería ser de seis años, para continuar directamente con el doctorado”. Los miembros de la Comisión Nacional de Carrera de Física presentes cruzamos miradas en silencio: esa era exactamente la idea que habíamos generado independientemente, pensando en egresados con el título de Máster en Física, y que en algún momento propondríamos al Ministerio de Educación Superior -a sabiendas de que difícilmente nos enfrentaremos a un camino cubierto de rosas.

La anécdota tuvo lugar en el salón de reuniones del decanato de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana, el jueves 11 de octubre de 2018, exactamente a las 2:15 PM. El profesor von Klitzing –descubridor del efecto Hall cuántico y director del instituto Max Planck de Física del Estado Sólido en Alemania– se encontraba de visita en Cuba por algunos días. En esa jornada ya había impartido una clase magistral en el anfiteatro del edificio “Varona”, luego de lo cual se había programado la reunión que nos ocupa, en la que participaba la presidenta de la Sociedad Cubana de Física (SCF) María Sánchez-Colina, el decano de la Facultad de Física Dr. Arbelio Pentón-Madrígal, miembros de la directiva de la SCF, y líderes científicos de nuestra facultad. Más tarde, von Klitzing realizaría un conversatorio con nuestros estudiantes.

Además de opinar sobre la duración de la carrera de Física, el invitado insistió sobre la importancia de nunca abandonar la investigación fundamental. También mencionó la necesidad de tomar medidas para evitar la emigración de jóvenes talentos, poniendo como ejemplo el caso de China, donde las condiciones para los científicos y científicas dentro del país contribuyen a traer de vuelta una notable proporción de los jóvenes que han realizado estudios de post-grado en el extranjero.

Al oír la idea de la carrera de seis años en boca de von Klitzing, no pude evitar recordar otra anécdota ocurrida durante la visita del premio Nobel de Química Walter Kohn a nuestra

Facultad en diciembre de 2002. En un encuentro con el creador del método de la Matriz de Densidad, el Decano de por aquel entonces me había pedido que realizara una breve exposición sobre nuestro Plan de Estudios: un riguroso esquema de formación de pregrado de 5 años de duración, basado en una combinación de la sólida escuela de Física soviética, con lo mejor de la estadounidense, complejizada con la inclusión de otros ingredientes: desde Educación Física y el idioma Inglés, hasta las ciencias sociales. Tras mi exposición, le preguntamos al profesor Kohn si tenía alguna pregunta que hacer. El anciano nos dejó pensado tras un único, lacónico comentario: “Realmente, creo que en el programa es muy riguroso, pero me preocupa una cosa: no veo que los estudiantes tengan tiempo para pensar”. Me temo que la reducción de la duración de las carreras según el Plan de Bologna no apunta precisamente a resolver este dilema -que podríamos traducir como el problema de la insuficiente maduración del pensamiento científico y la habilidad experimental en los jóvenes licenciados.



Figura 1. El premio Nobel de Física Klaus von Klitzing imparte una conferencia magistral en el anfiteatro del edificio “Varona” de la Universidad de La Habana, ante estudiantes y profesores de esta institución, el 11 de octubre de 2018. Sorpresivamente, von Klitzing hizo circular su medalla Nobel entre los presentes (Foto del autor).

Levantando la vista hacia el horizonte, la salvación de la Física en Cuba podría beneficiarse de otros elementos. Recuerdo, por ejemplo, la sugerencia del recientemente fallecido Premio Nobel de Física León Lederman¹, que en una entrevista ofrecida en Cuba, expresó: “...propongo un laboratorio del Caribe que podría estudiar problemas como la mitigación de desastres”². De hecho, en la facultad de Física

¹Ver su obituario en este mismo número.

²“Los físicos tenemos un problema genético: el optimismo”. Periódico “Granma”, 10 de Julio de 2003

tenemos en mente impulsar un laboratorio precisamente sobre este tema, con énfasis en la Física de la erosión de las playas y la protección de los arrecifes coralinos –el financiamiento, desde luego, constituye el principal problema.

Pero por el momento, la tarea decisiva es la de mitigar el desastre mayor: el hecho de que la Física cubana amenaza con reducir su actividad a niveles críticos, peligrando una bella y sacrificada obra que nació casi huérfana y llegó a florecer a lo largo del último medio siglo.

Parafraseando al propio León Lederman, yo también sufro de un problema genético: el optimismo. Por eso estoy seguro de que lo lograremos. Pero la tarea sería mucho más fácil si quienes tienen en sus manos la toma de decisiones prestaran atención a las opiniones de los Nobel... las que, no por mera casualidad, tienden a coincidir con las de muchos de sus colegas cubanos.

Agradezco a Carlos Rodríguez-Castellanos su lectura crítica de este artículo.

STOCHASTIC MODEL OF MOLECULAR DIFFUSION IN OPTICAL LATTICES

MODELO ESTOCÁSTICO DE LA DIFUSIÓN DE MOLÉCULAS EN REDES ÓPTICAS

E.E. TORRES MIYARES, L. CRUZ RODRÍGUEZ, L. URANGA PIÑA, A. MARTÍNEZ MESA[†]

DyNAMoS (Dynamical processes in Atomic and Molecular Systems), Faculty of Physics, University of Havana, Cuba; aliezer@fisica.uh.cu[†]

[†] corresponding author

Recibido 20/3/2017; Aceptado 12/12/2017

The present study focuses in the investigation of the diffusion of polar molecules on the structures known as optical lattices (a periodic generalization of optical traps); and in the assessment of the influence of a time dependent electromagnetic field on the motion of molecule. To study this phenomenon, the particle is considered to move under the influence of a one-dimensional potential which reproduces the main characteristics of the optical lattice. Starting from the canonical representation of the electromagnetic field, it has been introduced an equivalence between this field and an ensemble of harmonic oscillators. This allows to derive an effective Langevin equation to describe the motion of the particle interacting with the bath oscillators. We analyze the influence, on the diffusion dynamics, of the parameters which determine the shape of the electromagnetic pulses, which constitutes a key ingredient for the design of optimal fields that enable an efficient control of molecular dynamics.

El presente estudio se centra en la investigación de la difusión de moléculas polares en las estructuras conocidas como redes ópticas, (una generalización periódica de las trampas ópticas), así, como la evaluación de la influencia de un campo electromagnético externo dependiente del tiempo sobre el movimiento de la molécula. Para el estudio de este fenómeno la molécula se considera sometida a un potencial unidimensional que reproduce las características esenciales de la red óptica. A partir de la forma canónica de las ecuaciones del campo electromagnético, se introduce una equivalencia entre el campo externo y un conjunto de osciladores armónicos. Esta equivalencia permitió derivar una ecuación de Langevin efectiva para describir el movimiento de la molécula en interacción con el baño de osciladores. Se analiza la influencia, sobre la dinámica de difusión, de la variación los parámetros que determinan la forma de los pulsos electromagnéticos, lo que constituye un ingrediente importante para el diseño de campos óptimos que permitan controlar de forma eficiente la dinámica molecular.

PACS: Stochastic analysis methods (Métodos de análisis estocástico), 05.10.Gg; Atoms in optical lattices (Átomos en redes ópticas), 37.10.Jk; Molecular dynamics calculations in atomic and molecular physics (Cálculos de dinámica molecular en física molecular y atómica), 31.15.xv.

I. INTRODUCTION

Optical lattices are formed as a result of the interference of two laser beams that propagate in opposite directions, creating a steady pattern that repeats periodically in space. The spatial modulation of the electromagnetic field allows to trap atoms and neutral molecules within the region occupied by the optical lattice. The particles are concentrated in the vicinity of the potential minima, therefore the lattice can be considered as a periodic arrangement of micro traps. In this sense, these networks constitute the natural generalization of optical traps, which played a major role in the observation in 1995, for the first time, of the state of matter known as Bose-Einstein condensate [1].

Analogous to optical traps, lattices allow the study of atoms and molecules isolated from the environment at ultra low temperatures (of the order of micro- or nano-Kelvin) [2]. On the other hand, optical lattices provide the additional possibility to investigate the behavior of condensed-phase correlated systems [3], with potential applications in the development of quantum information, atomic transistors, analysis of dissipation mechanisms, etc. The problems that appear in the study of atoms and molecules in optical lattices

present a formal analogy with the dynamics of electrons in the periodic potential of a crystal, even though the values of the characteristic magnitudes are not the same (the spatial period of the network is of the same order as the wavelength of the laser from which it originates, about 1000 or 10000 times larger than in crystalline solids).

The most important parameters that characterize an optical lattice are the depth of the potential wells and the spatial periodicity. The well depth of an optical lattice can be adjusted in real time by changing the power of the laser. The periodicity can also be modified by varying the wavelength of the laser or by changing the relative angle between the two rays. This flexibility is one of more attractive properties of this type of systems, since atoms and molecules confined in an optical lattice can be used to study many-body effects that are difficult to observe directly in real crystals.

One of the key strategies to study the motion of the trapped particles is to act on them an additional time-dependent electromagnetic field whose intensity is much lower than that of the beams building up the network. The detailed knowledge of the characteristics of the diffusion of atomic and molecular species through is for the design of the experiments to be carried out in optical lattice, since these

displacements can facilitate or hinder the occurrence of certain phenomenon.

The purpose of this paper is to present an alternative treatment for the theoretical description of the motion of a particle in a one-dimensional potential resembling an optical lattice and under the influence of a weak, additional electromagnetic field. The methodology is based on the equivalence between the external field and a set of uncoupled one-dimensional harmonic oscillators, described in Section II. In Section III, we present the derivation of the Langevin equation and numerical examples that illustrate the validity of neglecting memory effects in the calculation of dissipative forces. In section IV the main conclusions of this work are presented.

II. HAMILTONIAN OF THE SYSTEM

II.1. System

The system consists in a neutral particle of mass m and dipole moment \vec{d} , which moves along the X axis under the influence of a periodic potential $V(x) = V(x + L)$, where L is the period of the lattice.

II.2. Equivalence between the electromagnetic field and a set of harmonic oscillators

Using the Landau gauge [4] for the vector and the scalar potentials, the set of Maxwell equations in the vacuum (i.e., in a region free of charges and currents) can be written as follows

$$\nabla^2 \vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = 0. \quad (1)$$

The decomposition of space in a three dimensional array of cubes of lengths L_x, L_y, L_z leads to the following condition for the vector potential: \vec{A}

$$\vec{A}(x, y, z) = \vec{A}(x + L_x, y + L_y, z + L_z). \quad (2)$$

Hence the solution of the wave equation (2) can be represented as:

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \sum_j \vec{q}_j(t) \exp(ik_j \cdot \vec{r}). \quad (3)$$

The following equation

$$\ddot{\vec{q}}_j(\vec{k}, t) + \omega_j^2 \vec{q}_j(\vec{k}, t) = 0. \quad (4)$$

To determine the vector potential at a given point in space and at a given time it is necessary to know the set of amplitudes $\vec{q}_j(t)$. Therefore, the state of the field is characterized by the infinite set of solutions $\vec{q}_j(t)$ of the ordinary differential equation (4), which coincides with the equation of motion of a linear harmonic oscillator. In this way, the electromagnetic field can be formally replaced by a mechanical system comprising a set of infinite uncoupled oscillators.

II.3. Molecule-field interaction

The original problem of a particle moving under the influence of a periodic potential and an external time-dependent electromagnetic field has been mapped (through the correspondence described above) into the equivalent problem of a particle subjected to periodic potential and interacting, at the same time, with an infinite numberable set of harmonic oscillators. The coupling between the molecule and the time-dependent field is termed H_{sb} , in analogy to the system bath interaction within the dipole approximation, it reads.

$$H_{sb} = -\vec{d} \cdot \vec{E}(t). \quad (5)$$

Assuming the electric field is linearly polarized, it can be rewritten as

$$H_{sb} = 2d \sum_j \left[\omega_j \text{Im} \left\{ A_j \exp(ik_j x) \right\} \right], \quad (6)$$

where $d = \vec{d} \cdot \hat{e}$ and \hat{e} is the polarization vector. Hereafter, we make use of the one-dimensional character of the problem and we employ scalar quantities only. Expressing eq. (6) in terms of the generalized coordinates q_j and momenta π_j of the field oscillators. The following expression for the interaction term

$$H_{sb} = d \sum_j \left[\left(\omega_j \sqrt{\varepsilon_0 L} \sin(k_j x) \right) q_j + \left(\sqrt{\frac{1}{\varepsilon_0 L}} \cos(k_j x) \right) \pi_j \right]. \quad (7)$$

It can be casted in the form

$$H_{sb} = \sum_j (\alpha_j q_j + \beta_j \pi_j), \quad (8)$$

Which obvious definitions for the function $\alpha(x)$ and $\beta(x)$. Eq (8) represent a special type of (non-linear) system-bath interaction, where the particle coordinate is coupled to both position and momenta of the bath modes.

III. DERIVATION OF THE LANGEVIN EQUATION

The total Hamiltonian of the system [5] is

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) + \frac{1}{2} \sum_j (\pi_j^2 + \omega_j^2 q_j^2) + H_{sb} + \frac{1}{2} \sum_j \left(\beta_j^2 + \frac{\alpha_j^2}{\omega_j^2} \right). \quad (9)$$

It consists of the standard contributions: the energy of the system and the bath, the system-bath coupling and the counter-term ensuring $V(x)$ remains the bare potential Hamilton's canonical equations can be combined to yield the following equations of motion for the bath oscillators and for the position of the particle

$$\ddot{q}_j + \omega_j^2 q_j = \beta_j' \dot{x} - \alpha_j, \quad m\ddot{x} + \frac{dV}{dx} = - \sum_j (\alpha_j' q_j + \beta_j' \pi_j). \quad (10)$$

The integration of the equations of motion corresponding to the coordinates q_j can be carried out analytically using Green's method [6]. Substituting the functions $q_j(t)$ in

Newton's second law for variable x yields Langevin equation that describes the motion of the particle

$$m\ddot{x} + \frac{dV}{dx} + \int K(t-t')\dot{x}(t')dt' = f(t). \quad (11)$$

The dissipation kernel $K(t-t')$ is calculated using the expression

$$K(t-t') = \sum_j \left(\frac{\beta'_j}{\omega_j} \sin[\omega_j(t-t')] - \frac{\alpha'_j}{\omega_j^2} \cos[\omega_j(t-t')] \right). \quad (12)$$

Although eq. (11) is deterministic second order differential equation, if the spectrum of the electric field $\vec{E}(t)$ is centered at high frequencies, the force

$$f(t) = \sum \cos(\omega_j t) \left[\frac{\alpha_j \alpha'_j}{\omega_j^2} + \alpha'_j q_{j0} + \pi_{j0} \beta'_j \right] + \sum \sin(\omega_j t) \left[\frac{\alpha'_j \pi_{jp}}{\omega_j} - \omega_j q_{j0} \beta'_j - \frac{\alpha_j \beta'_j}{\omega_j} \right] - \sum \left(\frac{\alpha'_j \alpha_j}{\omega_j^2} + \beta_j \beta'_j \right). \quad (13)$$

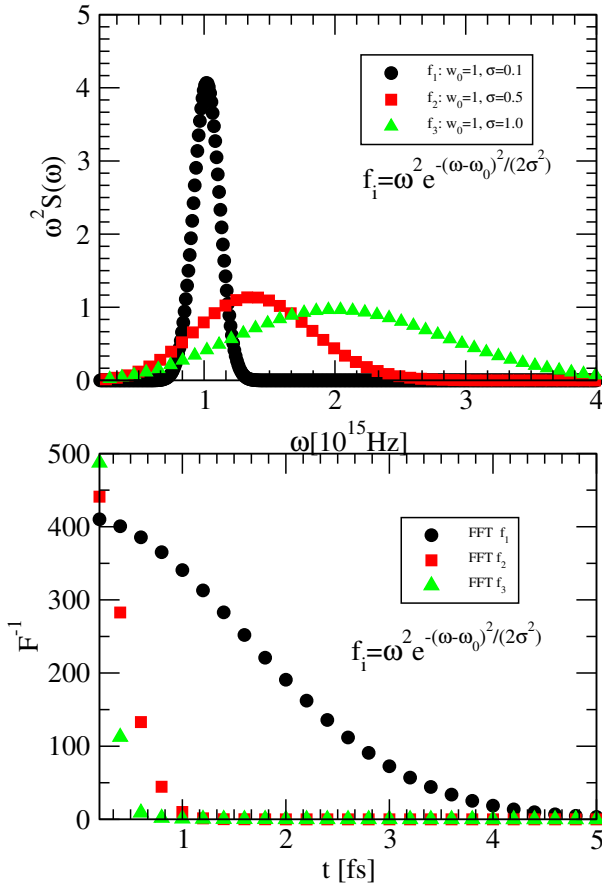


Figure 1. Top panel: Weights $f_i(\omega)$ of bath oscillators for different widths of a Gaussian laser pulse. Bottom panel: Inverse Fast Fourier transform F^{-1} of the functions $f_i(\omega)$.

Can be regarded as a stochastic fluctuation after some algebra, and introducing the change of variable $t-t' = \tau$,

the generalized Langevin equation can be finally written as

$$m\ddot{x} + \frac{dV}{dx} + f(t) + \pi \frac{d^2}{c^2 \epsilon_0 L} \int_0^t K(\tau) \dot{x}(t-\tau) d\tau = 0. \quad (14)$$

If we introduce the spectral density $S(\omega) = \sum_j \delta(\omega - \omega_j)$, it can be shown that the dissipation kernel $K(\tau)$ can be computed as the inverse Fourier transform of the even prolongation of the function $\omega^2 S(\omega)$. In Figs. 1 and 2, we plot the functions $\omega^2 S(\omega)$ and the behavior of the corresponding kernels $K(\tau)$ for a Gaussian wavepackets $S(\omega) = e^{-(\omega-\omega_0)^2/2\sigma^2}$ widths σ (Fig. 1) and centered at different frequencies ω_0 (Fig. 2).

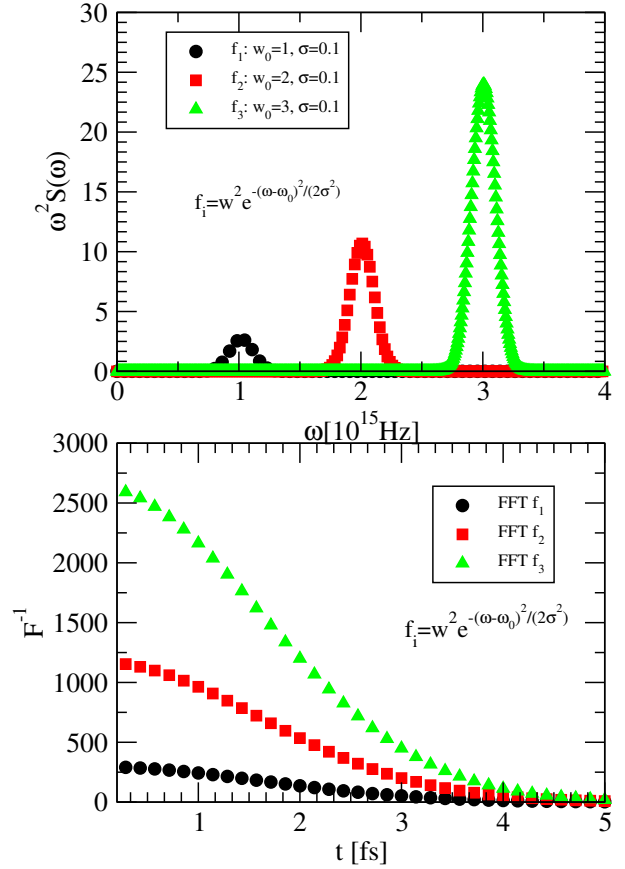


Figure 2. Top panel: Weights $f_i(\omega)$ of bath oscillators for different central frequencies of a Gaussian laser pulse. Bottom panel: Inverse Fast Fourier transform F^{-1} of the functions $f_i(\omega)$.

All the cases considered correspond to rapidly decaying kernels, so the particle velocity can be regarded as constant during the typical oscillation period of the field modes. Therefore the standard (Markovian) Langevin equation [7].

$$m\ddot{x} + \frac{dV}{dx} + f(t) + \dot{x}(t) \pi \frac{d^2}{c^2 \epsilon_0 L} \int_0^t K(\tau) d\tau = 0, \quad (15)$$

represents a suitable approximation for the investigation of the diffusion of polar molecules on optical lattices under the conditions considered in this work.

IV. CONCLUSIONS

We present an effective Langevin equation to be used to study the motion of a polar molecule under the influence of a periodic potential and a time-dependent electromagnetic field. The equation was derived using the equivalence between the transient electromagnetic field and a set of harmonic oscillators.

Although the effective Langevin equation resembles the standard treatment of system-bath dynamics, it presents some distinct features. The molecule couple, both the coordinates and the moment of the bath oscillators. Likewise the spectral density $S(\omega)$ contains information about the the normal modes of the distribution of field whereas the intensity of the coupling is given by the product $\omega^2 S(\omega)$.

From the molecular displacements, the exponent was determined that characterizes the speed of the diffusion process, being that this corresponds to the superdiffusive regime. It has been investigate the temporal evolution of the distribution of molecules on the surface. Calculations on the time evolution of the density distribution of different molecular species on the lattice, the characterization of the diffusion regime and its dependence on the characteristics of the external electromagnetic field are currently underway.

Taking into account the relative simplicity of the modeling of the effects of the interaction between a system and a thermal bath (composed of a very large number of harmonic oscillators), with respect to the theoretical treatment of the field molecule coupling subsystems. The methodology introduced in this work paves the way for a quantum study of the diffusion of neutral molecules in optical lattices using the theory of open quantum systems.

REFERENCES

- [1] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. Pitaevskii, and S. Stringari, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 463 (1999).
- [2] R. Fulton, A. I. Bishop, M. N. Shneider and P. F. Barker, *Nat. Phys.* **2**, 465 (2006).
- [3] I. Bloch, *Nat. Phys.* **1**, 23 (2005).
- [4] B.G. Levich, *Course in Theoretical Physics*, (Editorial Reverte S.A., Barcelona, España, 1974).
- [5] J. Rosa and M. W. Beims, *Phys. Rev. E* **78**, 031126 (2008).
- [6] K. R. Symon, *Mechanics*, 2nd. Ed., (Editorial Addison-Wesley, Massachusetts, US, 1960).
- [7] G. A. Pavliotis and A. Vogiannou, *Fluct. Noise Lett.* **08**, L155 (2008).

This work is licensed under the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0, <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0>) license.



LOGARITHMIC POTENTIAL BRANEWORLD IN LIGHT OF THE RECENT EXPERIMENT OBSERVATION

POTENCIAL LOGARÍTMICO DE MUNDO-BRANA A PARTIR DE OBSERVACIÓN EXPERIMENTAL RECIENTE

M. FERRICHA-ALAMI^{a,b,c†}, O. JDAIR^{a,b}, H. CHAKIR^{b,c} AND M. BENNAI^{a,c}

a) LPMC, FSBM, Universite Hassan II Casablanca, 20453 Morocco.; ferrichalami@yahoo.fr[†]

b) Centre de Physique Mathématique (CPM), Rabat, 10090 Morocco

† corresponding author

Recibido 12/5/2018; Aceptado 29/8/2018

In the loop inflation standard case, the spectral index n_s depends only on the e-folds number N , and it is larger than the value given by observational measurements. The ratio of tensor to scalar perturbations r is very small so that the gravitational waves are negligible. Therefore, we reconsider this model in the framework of the Randall-Sundrum II braneworld scenario. In this context, we have computed and discussed the perturbation of the scalar curvature and determined the energy scale V_0 , and the brane tension value λ . We showed that the various inflationary spectrum perturbation parameters (n_s , r and $\frac{dn_s}{d \ln k}$) depend on N and on the coupling constant α , and we reproduce the central value of the first parameter $n_s \sim 0.96$. Also, the ratio r and the running $\frac{dn_s}{d \ln k}$ are in perfect agreement with the experimental observations (Planck 2015).

En el caso estándar de inflación de bucle, el índice espectral n_s solo depende del número de pliegues N , y es más grande que el valor dado por las mediciones de observación. La relación r de tensor a perturbaciones escalares es muy pequeña, de modo que las ondas gravitatorias son insignificantes. Por lo tanto, reconsideramos este modelo en el marco del escenario del Mundo-Brana de Randall-Sundrum II. En este contexto, hemos calculado y discutido la perturbación de la curvatura escalar y hemos determinado la escala de energía V_0 ; y el valor de la tensión de brana λ . Mostramos que los diversos parámetros de perturbación del espectro inflacionario (n_s , r y $dn_s/d(\ln[k])$) dependen de N y de la constante de acoplamiento α , y reproducimos el valor central del primer parámetro $n_s \sim 0.96$. Además, la relación r y el desplazamiento $dn_s/d(\ln[k])$ están en perfecto acuerdo con las observaciones experimentales (Planck 2015).

PACS: Branes (Branas) 11.25.-w; Inflationary universe (Universo inflacionario), 98.80.Cq.

I. INTRODUCTION

The inflation model provides a theoretical description of an accelerated expansion phase of our universe, and was introduced to solve the several problems associated with standard Big Bang cosmology, namely flatness, the horizon problem, the homogeneity and the numerical density of monopoles [1–3], and eventually to give an alternative explanation to some issues related to particle physics [4,5].

In that context, the inflation is supposed to be generated by some scalar degree of freedom, whose potential energy produces the required accelerated expansion of the early universe [6]. The key feature of a variety of inflationary models resides in the fact that the shape of the potential form in those models is not known, except that they must be related to a flat universe [7]. Further, the inflationary mechanism is supposed to take place at very high energies, in a regime where the corresponding particle physics comprehension of this domain is not well known [8]. Moreover, corresponding theoretical assertions have not been tested in accelerators. The inflationary models are based on scalar potentials, which must describe a flat universe and should oscillate around a minimum [9]. Since these potentials are considered a form of configurational or binding energy, they measure the amount of internal energy associated with a particular field value, and should also have a minimum in which inflation can

end [10,11]. In fact, the most potentials that describe the cosmological inflation, have been proposed to describe the standard or supersymmetric model of particle physics. These potentials are constructed in the context of particle physics, as models that take place from a form of energy (Action, Lagrangian...) [12].

In the last years, the braneworld scenarios have attracted a lot of attention as a novel extra dimension theory of inflation [13], especially the standard model of particles is confined to the brane, while gravitation propagates into the bulk space-time, where the extra dimensions introduced in the Friedmann equation like higher-dimensional objects (branes), higher curvature corrections to gravity [14]. One of the brane inflation scenarios, is the Randall-Sundrum II model [15]. This model has attracted a lot of interests to describe early inflation and recent acceleration of the universe in which our four dimensional universe is considered as a 3-brane embedded in five-dimensional anti-de Sitter space-time [16,17].

Furthermore, the validation of any model requires experimental data on cosmic fossils that are known by the cosmic microwave background (CMB) [18], which is considered an essential source of information about all epochs of the Universe. In this context, to investigate this model, we consider recent experiment results given by

observation Planck [19], which are based on the measurement of the properties of CMB temperature fluctuations, and gives the inflationary parameters, the scalar spectral index $n_s = 0.9653 \pm 0.0048$ (68% CL, TT+lowP+lensing), the fractional contribution of tensor modes is limited to $r \lesssim 0.11$ (95% CL), the running of spectral index $\frac{dn_s}{d \ln k} = -0.002 \pm 0.013$ (95% CL, TT+lowP+lensing), and the power spectrum of the curvature perturbations given by Planck, $P_R(k) = (2.130 \pm 0.053) \times 10^{-9}$. If we assume that all of these data sets are well-described by their published uncertainties, then these parameters provide a precise and accurate description of our universe.

Therefore, the simple and well motivated inflationary potentials are distinctively welcomed, such as the logarithmic potential, which has been introduced in the first time by Coleman and Weinberg (CW), in the context of the spontaneous symmetry breaking generated by radiative corrections of masses [20]. This considered potential has been used in different context, it has been found as a candidate to drive the inflation [21]. Thus, it was used to investigate the braneworld inflation [22]. As well, it has taken a logarithmic form to investigate of the tachyon [23]. Furthermore, a simple inflationary model: $V = V_0 \left(1 + \alpha \log\left(\frac{\phi}{Q}\right)\right)$ was proposed to the conversion F -term and D -term [24, 25]. However, in the standard case, the last model does not lead to red tilt of the spectral index, this means $n_s > 0.98$ for the frequent value of the e-folds number $N \sim 50$, and the ratio r is negligible.

Basing on the previous results of the standard model, which is not fully compatible with observational data, we revisit the various inflationary spectrum perturbation parameters of the logarithmic model, in framework braneworld RSII. Therefore, for the brane tension value in the range $\lambda \sim (1 - 10) \times 10^{57} GeV^4$, and the natural value of the coupling α , we show that the spectral index can take the central value $n_s \sim 0.96$ and the ratio r becomes important and can reach the value 0.11.

This work is organized as follows. In section 2, we first recall the perturbation spectrum expressions of RSII model and the brane tension effect at high energy approximation. In section 3, we present our results concerning the different parameter values of loop inflation model, and we show that they are compatible with the recent experimental observation. The last section is devoted to a conclusion.

II. BRANEWORLD INFLATION FORMALISM

The braneworld cosmology offered another new approach to our understanding of the universe. It has proposed that our universe is a three dimensional surface (3-brane) embedded in a higher dimensional space. Taking for example the ekpyrotic model, which postulate that the universe did not start in a singularity, but came about from the collision of two branes colliding with each other, causing the exchange of energy which generated our universe [26, 27]. Generally, in braneworld scenario, the observable universe can be considered as 3-brane, embedded in $4 + d$ dimensional spacetime, particles and fields are trapped on the brane while gravity is free to access the bulk. Furthermore, the

string theory includes the brane model, contains the basic ingredients, such as extra dimensions, higher dimensional objects, which are the branes. Since, the aim of the string theory is to give us a basic description of the nature, it is important to study this kind of cosmology predictions. Thus, the inflationary models have been analyzed in 4-dimensional cosmology; it is challenging to discuss them in alternative gravitational theories as well. The string theory proposes that the ordinary matter is confined to brane of four-dimensional, while gravity propagates in the whole spacetime [28].

In this paper, we consider the Randall-Sundrum II model, where $d = 1$, which means that a single brane embedded in five-dimensional AdS space with a Z_2 reflection symmetry imposed on the bulk. Consequently, the action of the field equation in RSII model is written in Refs. [15, 28] as

$$S_{RSII} = \int dx^5 \sqrt{-g_5} \left[\frac{m_5^3}{2} \hat{R} + \Lambda_5 \right] + \int d^4x \sqrt{-g_4} L_{brane}, \quad (1)$$

where \hat{R} is the Ricci curvature scalar of the bulk spacetime, with the bulk metric g_5 . m_5 is the five-dimensional Planck mass and Λ_5 is the five dimensional cosmological constant. The second term is the action of the Lagrangian density of the matter on the brane, which given by

$$L_{brane} = L_{matter} + \lambda = |\partial\Phi|^2 - V + \lambda, \quad (2)$$

where V is the scalar potential and λ is the brane tension.

The dynamics was determined and developed more precisely in reference [29, 30]. It was originally proposed as an alternative resolution of the hierarchy problem arising from the large difference between the Plank scale and the electroweak scale. This model is based on a brane which has positive tension. In this theory, the metric projected on the brane is a spatially flat, and the Friedmann equation is generalized as in Ref. [31]

$$H^2 = \frac{8\pi}{3m_p^2} \rho \left(1 + \frac{\rho}{2\lambda}\right), \quad (3)$$

where H is the Hubble parameter, ρ is the energy density, and $m_p = 1.2 \times 10^{19} GeV$ is the four-dimensional Planck. In high energy limit approximation $V \gg 2\lambda$, one has to use slow roll parameters, which are given by [31]

$$\epsilon = \frac{m_p^2}{4\pi} \frac{\lambda V'^2}{V^3}, \quad \eta = \frac{m_p^2}{4\pi} \frac{\lambda V''}{V^2}, \quad \xi^2 = \frac{m_p^4}{16\pi^2} \frac{\lambda^2 V' V'''}{V^4}, \quad (4)$$

where $V'' = \frac{d^2 V}{d\phi^2}$ and $V' = \frac{dV}{d\phi}$.

During inflation $\epsilon \ll 1$ and $|\eta| \ll 1$, so that Inflationary phase will terminate when the universe heats up when the condition $\epsilon = 1$ (or $|\eta| = 1$) is satisfied.

The small quantum fluctuations in the scalar field lead to fluctuations in the energy density, which is known to be related to the scalar curvature perturbation. For that reason, and in approximation $V \gg 2\lambda$, the power spectrum of the curvature perturbations is given as

$$P_R(k) \simeq \frac{16\pi}{3m_p^6} \frac{V^6}{V'^2 \lambda^3}. \quad (5)$$

One can also define the the various inflationary spectrum perturbation parameters as

$$n_s \simeq -6\epsilon + 2\eta + 1, \quad r \simeq 24\epsilon, \quad \frac{dn_s}{d \ln k} \simeq 16\epsilon\eta - 18\epsilon^2 - 2\xi^2. \quad (6)$$

In high energy limit approximation $V \gg 2\lambda$, the number of e-folds of inflation generated since the modes that are entering the observable Universe now left the horizon (at ϕ_*) till the end of inflation (at ϕ_{end}) is given by [31]

$$N \simeq -\frac{4\pi}{m_p^2 \lambda} \int_{\phi_*}^{\phi_{end}} \frac{V^2}{V'} d\phi, \quad (7)$$

Brane tension effect

Braneworld inflation models have been proposed from extra dimensional theories, to give solutions to the problems of the standard Big-Bang model. One finds among these model is the Randall-Sundrum-II, which is one of the simplest phenomenological models. For that, it was suggested by some works, in order to explain the hierarchy problem. This model is characterized by the parameter λ , which its value depends on the model or type of the problem addressed. Hence the brane tension λ is not a generic result and does not lead to a unique value, so that certain works suggest the brane tension value vary from $10^{52} GeV^4$ to $10^{64} GeV^4$. For instance the paper [32] discusses the validity of chaotic braneworld model from the power spectrum of the curvature perturbations P_R and the scalar spectral index n_s with values of m_5 up to $2.4 \times 10^{17} GeV$ implies $\lambda \sim 10^{64} GeV^4$. To reduce the values of coupling constant in order to take the natural values, and to refine the phase of inflation field in Affleck–Dine inflation model, the brane tension was found about $\lambda \sim 10^{60} GeV^4$ [33]. Moreover, in work [34] the authors investigate the aspects of thermal leptogenesis in braneworld, and they found that the thermal equilibrium is expected at $m_5 \leq 10^{16} GeV$ that is $\lambda \leq 10^{58} GeV^4$.

In addition, in the work [35], authors have shown that for some value of brane tension $\lambda \sim (10^{57} GeV^4)$, the fine tuning problem is eliminated, and the value of FI-term ξ is reduced leading to the resolution of cosmic string problem. Else, to solve the problem related to the topological defects, caused by the instability of the magnetic monopoles, the brane tension value has been found $\lambda \sim (1 - 10) \times 10^{52} GeV^4$ [36], and in other work $\lambda \sim (1 - 10) \times 10^{50} GeV^4$ [37]. Moreover, in other models, the brane tension value λ is variable or it is dependent on other parameters [17, 22].

III. LOOP CORRECTION POTENTIAL IN BRANEWORLD

The main goal of this section is to reassess within the framework of the approximation high energy limit RSII braneworld model, the inflationary predictions correspond the loop correction potential [24, 25]

$$V(\phi) = V_0 \left[1 + \alpha \log\left(\frac{\phi}{Q}\right) \right], \quad (8)$$

where V_0 is the constant determining the energy scale, Q is the renormalization scale and α is a dimensionless parameter that tunes the strength of the radiative effects.

In fact, this inflationary potential was invented in the context hybrid inflation in supersymmetric theories (F-term and D-term), in which the two real scalar fields ψ and ϕ play crucial rule. The first field ψ provides the vacuum energy density that drives inflation and the other field varies slowly and represent inflaton field. Inflation ends by a rapid rolling of the field ψ so-called waterfall, triggered by the slow rolling of the field ϕ . In this type of scenarios, the energy scale Λ is in order of GUT scale so $\Lambda \sim 10^{16} GeV$. The parameter α corresponds the coupling of the inflaton ϕ to the waterfall field ψ , in such way that α equal the fraction $g^2/8\pi^2$ [24, 25], where $g \lesssim 1$ so that $\alpha \lesssim 10^{-2}$, and $V_0 = g^2 \Lambda^4$ so that $V_0 \sim 10^{60} GeV^4$.

In this work, we study the inflationary consequence of the braneworld RSII model of this potential, in which we adjust the coupling α (so that g) between the inflaton and the waterfall field to be strong, and evaluate the brane tension value λ in order to validate this model.

In high energy limit approximation $V \gg 2\lambda$. From Eqs. 4 and 8, the slow-roll parameters are given as

$$\epsilon = \frac{\alpha^2 m_p^2 \lambda}{4\pi V_0 \phi^2}, \quad \eta = \frac{\alpha m_p^2 \lambda}{4\pi V_0 \phi^2}, \quad \xi = \frac{\alpha^2 m_p^4 \lambda^2}{8\pi^2 V_0^2 \phi^4}. \quad (9)$$

The end of inflation is determined either by the failure of the slow-roll conditions when $\epsilon = 1$, which gives the following expression of the scalar field ϕ_{end} at the end of inflation as

$$\phi_{end} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\alpha \lambda}{\pi V_0}} m_p. \quad (10)$$

Eqs. 7 and 8 give the number of e-folds, as the integrated expansion from ϕ_* to ϕ_{end}

$$N = \frac{2\pi V_0}{\alpha m_p^2 \lambda} (\phi_*^2 - \phi_{end}^2). \quad (11)$$

From the Eqs. 11, 10, we calculate the inflaton field ϕ_*

$$\phi_* \simeq \left(\frac{\alpha(2+N)\lambda}{2\pi V_0} \right)^{1/2} m_p. \quad (12)$$

On the other hand, taking into account Eqs. 5, 8 and 12, the expression of the amplitude of the power spectrum becomes

$$P_R(k) \simeq \frac{8}{3m_p^4} \frac{V_0^3(2+N)}{\alpha \lambda^2}. \quad (13)$$

From Eqs. 13, we can easily see that, the power spectrum, of the curvature perturbations, depends on the following variables : V_0 , λ , α and N . Then, from the Eqs. 6 and 9 the expression of the spectral index n_s , the ratio tensor to scalar r and the running the spectral index $\frac{dn_s}{d \ln k}$ are given by

$$n_s - 1 = -\frac{3\alpha + 1}{2 + N}, \quad r = \frac{12\alpha}{2 + N}, \quad \frac{dn_s}{d \ln k} = -\frac{3\alpha + 1}{(2 + N)^2}. \quad (14)$$

One can easily see from the above equation 14 that the inflationary parameter values are dependent on the values of e-fold number N and the parameter α . However, we see that brane tension λ does not appear in the expressions of the n_s , r and $\frac{dn_s}{d \ln k}$, but is responsible for the appearance of the parameter α .

One would conclude that the inflationary trajectory is not affected with brane tension which is far from being correct. In fact, if we look at the expression of the scalar curvature perturbation 13, we can plot the variation of the brane tension with respect of the other parameters adjust the value of $P_R(k)$. Furthermore its effect is altered in the calculation, since the standard expressions of the same potential is significantly different from what we have found: in the standard case $n_s = 1 - \frac{1}{N}$, $r \approx \frac{4\alpha}{N}$, where $\alpha = g^2/8\pi^2$ ($g \leq 1$) [24, 25]. In the last case, for the most frequent value of e-folds $N = 50 - 60$, the scalar curvature perturbation is $n_s \geq 0.98$ and the ratio r is very small, so that the gravitational wave is negligible. These are constraints prevent this model to be a good candidate to drive inflation in the standard case.

Thus it is of great interest to adjust this situation, and look at braneworld context predictions. Keeping that in mind, we pursue the computation of the perturbation spectrum parameters in the brane world case.

Numerical results

Firstly, we set the value of the number folding in the most commonly used value $N = 50$, and we fix it at $V_0 = 10^{60} GeV^4$ to be in the order of Grand Unified Theories GUT so that $V_0^{1/4} = 10^{15} GeV$, which is perfectly in agreement with the observations [19]. The by using the central value of the power spectrum $P_R(k) \approx 2.13 \times 10^{-9}$, we will look for the brane tension λ and the constant α , to discuss the inflationary parameter values, in order to validate this model.

Let's begin by some values of α : for $\alpha = 0.005$ gives $\lambda = 7 \times 10^{57} GeV^4$. If we set $\alpha = 0.1$ we get $\lambda = 2 \times 10^{57} GeV^4$. Then, if we take $\alpha = 0.48$, we get $\lambda = 1 \times 10^{57} GeV^4$. Focus now our attention on the values of the scalar curvature perturbation. Planck measurement indicate that it should be $n_s \in [0.96 - 0.97]$. This will implies that the parameter α should be restricted to take any values in the following interval $[0.18 - 0.35]$. As a consequence the brane tension must be in the range $\lambda \sim (2.8 - 3.2) \times 10^{57} GeV^4$.

We can do more computation, by considering at the same time the obtained spectrum of the inflationary parameter (n_s , r and $\frac{dn_s}{d \ln k}$). Thus, for $\alpha = 0.01$ gives $n_s \approx 0.98$, $r \approx 0.0023$ and $\frac{dn_s}{d \ln k} \approx -0.38 \times 10^{-3}$. Then, if we take $\alpha = 0.1$ we get $n_s \approx 0.975$, $r \approx 0.023$ and $\frac{dn_s}{d \ln k} \approx -0.48 \times 10^{-3}$. Now, if we set $\alpha = 0.4$, we get: $n_s \approx 0.957$, $r \approx 0.093$ and $\frac{dn_s}{d \ln k} \approx -0.82 \times 10^{-3}$.

These different values of the parameter α don't belong to the ranges that we determined above. Despite that fact, we have obtained tiny ratio of the scalar to tensorial perturbation amplitude. This behavior is similar to that of some successfully developed models like the Starobinsky model [38]. Apart from that, the scalar curvature perturbation is not consistent with Planck measurement. The central

value of the first inflationary parameter $n_s \sim 0.965$ can be reproduced when the brane tension λ is near to $10^{57} GeV^4$, and $\alpha = 0.27$.

In the following, we plot the curves describing the relative variation of the perturbation spectrum parameters (n_s , r and $\frac{dn_s}{d \ln k}$).

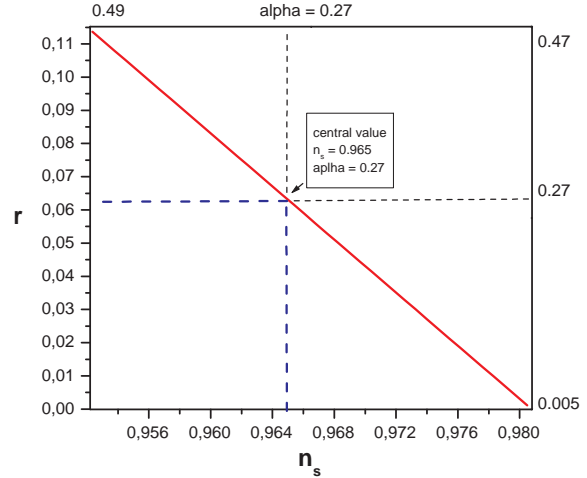


Figure 1. The evolution of the r versus n_s for various values of α .

Fig. 1 shows that the variation of r versus the scalar spectral index n_s , which behaves as a decreasing linear function with the variation of the coupling α . The central value of the spectral index $n_s \sim 0.96$ is reproduced when the coupling constant is about $\alpha \sim 0.27$. We can see also that the compatibility of the ratio r is realized with respect to the recent Planck data for $0.005 < \alpha < 0.48$.

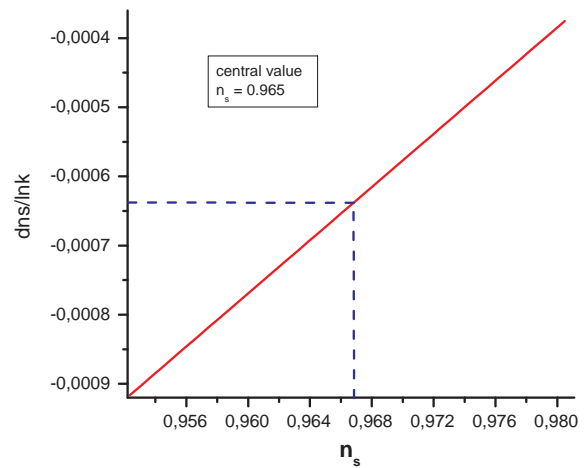


Figure 2. The evolution of the $\frac{dn_s}{d \ln k}$ versus n_s for various values of α .

Fig. 2 shows that the running of the scalar index $\frac{dn_s}{d \ln k}$ is an increasing function with respect to n_s . The central value of the scalar spectral index corresponds to $\frac{dn_s}{d \ln k} = -0.00067$. Also, the running takes the extremely weak values, which are widely consistent with recent observations.

To summarize this section, one can note that our computation is based on the addition of the fraction term $\frac{2\lambda}{V}$ in the expression

of inflationary parameters. In the high energies limit, the brane effect is to reproduce the expression of perturbation spectrum parameters by introduction the coupling constant α . This variation in the formulas of the perturbation spectrum results (n_s , r and $\frac{dn_s}{d\ln k}$) gives the compatibility with the recent observations, and consequently validating this model.

IV. CONCLUSION

In this work, we have studied the loop inflation model in the framework of the RSII braneworld model. We have used a logarithmic potential to evaluate various perturbation spectrum parameters. From the observed value of the power spectrum of the curvature perturbation $P_R(k)$, we have determined the energy scale $V_0 \sim 10^{60} GeV^4$, and we have evaluated the brane tension value $\lambda \sim (1 - 8) \times 10^{57} GeV^4$. Thus, for a suitable choice of the coupling constant α , which makes it to take much more natural value, we have obtained the central value of the spectral index $n_s = 0.96$. The values of the tensor to scalar ratio reaches the maximum value given by the observation $r \sim 0.11$, so that the gravitational waves becomes important, and running of the spectral index $\frac{dn_s}{d\ln k}$ is in excellent agreement with the latest observations of the Planck observations.

REFERENCES

- [1] A. D. Linde, Phys. Lett. B **108**, 389 (1982).
- [2] A. Guth, Phys. Rev. D **23**, 347 (1981).
- [3] K. Sato, Katsuhiko, Month. Not. Royol Astron. Society **195**, 467 (1981).
- [4] P. Adshead, and E. I. Sfakianakis, J. Cosmol. Astropart. Phys. **2015**, 21 (2015).
- [5] V. N. Senoguz and Q. Shafi, Phys. Lett. B **582**, 6 (2004).
- [6] A. R. Liddle and D. H. Lyth, Cambridge University Press, 2009.
- [7] D. H. Lyth and A. Riotto, Phys. Rep. **314**, 1 (1999).
- [8] H.P. Nilles, Phys. Rep. **110**, 1 (1984).
- [9] E. J. Copeland, et al., Phys. Rev. D **49**, 6410 (1994).
- [10] A. Mazumdar and J. Rocher, arXiv preprint arXiv:1001.0993.
- [11] A. R. Liddle, arXiv preprint astro-ph/9901124 (1999).
- [12] M. U. Rehman and Q. Shafi, Phys. Rev. D **81**, 123525 (2010).
- [13] P. Brax, C. Bruck and A. Davis, Rept. Prog. Phys. **67**, 2183 (2004).
- [14] D. Langlois, Theor. Phys. Suppl. **148**, 181 (2002).
- [15] L. Randall and R. Sundrum, Phys. Rev. Lett. **83**, 4690 (1999).
- [16] R. Maartens and K. Koyama, Living Rev. Rel. **7**, 7 (2004).
- [17] G. Calcagni, S. Kuroyanagi, J. Ohashi and S. Tsujikaw, J. Cosmol. Astropart. Phys. **3**, 52 (2014).
- [18] D. J. Fixsen et al., AstroPhys. J. **473**, 576 (1996).
- [19] Ade, P. et al. 2013 (Planck Collaboration), arXiv:1303.5076 [astro-ph.CO].
- [20] S. R. Coleman and E. J. Weinberg, Phys. Rev. D **7**, 1888 (1973).
- [21] Q. Shafi and V. N. Şenoğuz, Phys. Rev. D **73**, 127301 (2006).
- [22] G. Barenboim, E. J. Chun and H. M. Lee, Phys. Lett. B **730**, 81 (2014).
- [23] J. A. Minahan and B. Zwiebach, J. High Energy Phys. **9**, 29 (2000).
- [24] L. Boubekeur and D. H. Lyth, J. Cosmol. Astropart. Phys. **2005**, 1 (2005).
- [25] L. Alabidi and D. H. Lyth, J. Cosmol. Astropart. Phys. **2006**, 016 (2006).
- [26] J. Khoury, B.A. Ovrut, P.J. Steinhardt and N. Turok, Phys. Rev. D **64**, 123522 (2001).
- [27] L. Battarra and J. L. Lehnert, Phys. Rev. D **89**, 63516 (2014).
- [28] James E. Lidsey, Lect. Notes Phys. **646**, 357 (2004).
- [29] R. Maartens and K. Koyama, Living Rev. Rel. **7**, 7 (2004).
- [30] D. Langlois, R. Maartens and D. Wands, Phys. Lett. B **489**, 259 (2000).
- [31] R. Maartens, D.Wands, B. Basset, and I. Heard, Phys. Rev. D **62**, 41301 (2000).
- [32] G. Panotopoulos, Phys. Rev. D **75**, 107302 (2007)..
- [33] Z. Mounzi, M. Ferricha-Alami, H. Chakir and M. Bennai, Gen. Rel. Gravit. **48**, 1 (2016).
- [34] M.C. Bento, R. Gonzalez Felipe, N.M.C. Santos, Phys. Rev. D **73**, 23506 (2006).
- [35] A. Safsafi, A. Bouaouda, H. Chakir, J Inchaouh, and M. Bennai, Class. Quant. Grav. **29**, 215006 (2012).
- [36] M. Ferricha-Alami, H. Chakir, J. Inchaouh, and M. Bennai, Int. J. Mod. Phys. A **29**, 1450146 (2014).
- [37] M. Ferricha-Alami, Z. Sakhi, H. Chakir and M. Bennai, Eur. Phys. J. Plus **132**, 303 (2017).
- [38] A. A. Starobinsky, Sov. Astron. Lett. **9** (1983) 302.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0, <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0>) license.



SPIN-CROSSOVER IN MOLECULAR CRYSTALS: AN ELECTRON-COUPLED LOCAL VIBRATIONS MODEL

TRANSICIÓN DE ESPÍN EN CRISTALES MOLECULARES: UN MODELO DE ELECTRONES Y VIBRACIONES LOCALES ACOPLADAS

C. RODRÍGUEZ-CASTELLANOS^{a,b†}, Y. PLASENCIA^a, E. REGUERA^a

a) Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada (CICATA-Legaria), Instituto Politécnico Nacional, 11500 Ciudad de México, México

b) Facultad de Física, Universidad de La Habana, 10400 La Habana, Cuba; crc@fisica.uh.cu[†]

† corresponding author

Recibido 21/5/2018; Aceptado 21/9/2018

A model of eg electrons at octahedral sites coupled to local vibrational “breathing” modes interacting with its near neighbors is proposed to describe spin-crossover (SCO) in molecular crystals. Decoupling vibrations leads to an effective electron Hamiltonian with renormalized site energies, where ferromagnetic and antiferromagnetic, short range and long range electron-electron interactions arise in a natural way. An exact analytic expression for the free energy functional is derived. A phase diagram for homogenous phases, describing the basic phenomenology of SCO is obtained and the transition temperatures are expressed in terms of model parameters. Under appropriate conditions, two-step transitions are found to take place for systems with both, short range and long range interactions. Stability with respect to spatial fluctuations is discussed.

Para describir la transición de espín (SCO) en cristales moleculares se propone un modelo de electrones eg acoplados a modos de vibración locales “respiratorios” que interactúan con sus vecinos próximos. Al desacoplar las vibraciones resulta un Hamiltoniano electrónico efectivo con energías renormalizadas, donde las interacciones electrón-electrón ferromagnéticas y anti-ferromagnéticas, de corto y de largo alcance aparecen de modo natural. Se deriva una expresión analítica exacta para el funcional de energía libre. Se obtiene un diagrama de fases homogéneas que describe la fenomenología básica de la transición de espín y se calculan las temperaturas de transición en función de los parámetros del modelo. Bajo condiciones apropiadas, las transiciones en dos pasos resultan posibles tanto en sistemas con interacciones de corto como de largo alcance. Se discute la estabilidad respecto a las fluctuaciones espaciales.

PACS: Statistical mechanics of model systems (Mecánica estadística de sistemas modelo), 64.60 De; Spin crossover (Cruce de spin), 75.30. Wx; Molecular magnetism (Magnetismo molecular), 75.50. Xx

I. INTRODUCTION

Spin-crossover (SCO) is the transition between a low spin (LS) and a high spin (HS) state of a metal ion with d^4 - d^7 electronic configuration in an octahedral ligand field, under the action of external stimuli. The phenomenon has a wide presence in nature, especially in the case of the transition of Fe^{II} complexes between t_{2g}^6 ($S=0$) and $t_{2g}^4 e_g^2$ ($S=2$) configurations, which is responsible for oxygen transport in hemoglobin and probably for the change under pressure of ferropereclase in the Earth’s mantle. In solids, SCO can be found in many transition metal oxides, organometallic complexes, inorganic salts or organic radicals and has a cooperative nature, frequently leading to abrupt changes of macroscopic physical properties and hysteresis. A clear introduction and a broad perspective of the field can be found in the monographs [1] and [2].

The most common way of monitoring spin transitions is a plot of the HS fraction versus temperature, conventionally obtained from magnetic measurements or Mössbauer spectroscopy [3]. These spin transitions curves can be gradual, abrupt, hysteretic, two-steps or incomplete, depending on the degree of cooperativity of the spin system [4]. Complementary information about changes in structure and physical properties during the spin transition is obtained with the aid of many other experimental techniques.

Materials with abrupt SCO near room temperature and wide hysteresis loops are the focus of research in the field, because of potential applications in molecular electronics and spintronics [5]. The big theoretical challenge is to predict the spin transition curve for a specific material, including the transition temperatures and the width of the hysteresis loops. Macroscopic and semi-microscopic approaches, based in Landau theory of phase transitions and Ising-like models have contributed to the progressive understanding of SCO and related phenomena [6, 7]. A complete microscopic description requires the consideration of three basic elements: i) the spin and vibrational states of individual octahedral complexes, ii) the interactions between them leading to cooperative effects and iii) their connection to external factors like temperature, hydrostatic pressure, light irradiation, magnetic field and the chemical environment. Given the diverse nature of SCO compounds, it is unlikely that a single theory could account for all different behaviors. For example, in oxides cooperativity is attributed to electronic exchange and in molecular crystals to electron-phonon coupling [8]. Recent contributions [9] emphasize the key importance of strong coupling between eg electrons and molecular fully symmetric (“breathing”) vibration modes (instead of Jahn-Teller vibrations as previously proposed [10,11]) in determining the local energy pattern of SCO in molecular crystals. On the other hand, the

responsibility for cooperative phase transitions is attributed to the interaction with acoustic phonons propagating along the crystal. This difference had already been considered in phenomenological approaches through the introduction of two different elastic constants [12]. In reference [9] a detailed Hamiltonian containing the interactions between electrons, acoustic phonons and local fully symmetric vibrations has been proposed. After explicit shift transformation of phonon operators they are decoupled, leading to an effective, phonon mediated, electron-electron interaction, additional to the quadratic interaction with local vibrational modes. The approach has been generalized to SCO in binuclear compounds [13]. Unfortunately, such a detailed description requires drastic approximations (mean field, simple phonon models) to evaluate the HS fraction as a function of temperature. This paper presents a theoretical approach to SCO in mononuclear molecular crystals containing Fe^{II} ions, based in the same idea of reference [9], but in a simplified version. Instead of coupling to acoustic phonons, a simple effective interaction between neighboring local breathing modes is considered. Only electrons in e_g states are linearly coupled to vibrations, so there is no need for two breathing modes with different vibrational frequencies and coupling parameters. Next, decoupling breathing modes with successive canonical transformations leads to a lattice model where short range and long range ferromagnetic and antiferromagnetic interactions arise in a natural way. A general discussion of the phase diagram predicted by this model is possible without appeal to additional approximations.

II. MODEL

Consider a d-dimensional periodic array of ($i = 1, \dots, N$) mono-nuclear metal complexes, each containing an ion Fe^{II} in an octahedral site surrounded by non-magnetic ligands. The number of electrons occupying e_g states at ion "i" will be designed by n_i . Since the charge density distribution of the anti-bonding e_g states is more localized near their octahedral neighbors, these electrons, and not those at states t_{2g}, are strongly coupled to a local "breathing" vibration mode described by operators \hat{a}_i^+ , \hat{a}_i . Breathing modes at neighboring sites interact through acoustic phonons. The effective Hamiltonian for this electron-local vibrations system will be:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i + \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{V}_{ij}, \quad (1)$$

$$\hat{H}_i = \varepsilon n_i + \left(\hat{a}_i^+ \hat{a}_i + \frac{1}{2} \right) - \alpha n_i (\hat{a}_i^+ + \hat{a}_i), \quad (2)$$

$$\hat{V}_{ij} = -\frac{\lambda}{4} (\hat{a}_i^+ + \hat{a}_i) (\hat{a}_j^+ + \hat{a}_j). \quad (3)$$

In these expressions $\varepsilon > 0$ is the excitation energy per e_g electron, obtained by subtracting the splitting energy Δ between t_{2g} and e_g states and the pairing energy P in t_{2g} states, while α , γ are coupling parameters. The phonon energy $\hbar\omega$ of the local breathing mode when the ion is in

the HS state has been taken equal to one. This energy, in the order of 10² cm⁻¹, is too low to produce real transitions between different electron states ($\varepsilon \sim 10^3$ cm⁻¹). Coupling to local modes induces virtual transitions that renormalize electron energies, give rise to an effective electron-electron interaction and shift atomic positions (see below). To clarify the assumptions usually involved in this kind of model and to give the possibility to go beyond them, a detailed derivation has been included in the Supplementary Information [SA] accompanying this paper. The interaction Hamiltonian \hat{V}_{ij} is the simplest approximation to an effective inter-site coupling which could result from averaging over degrees of freedom (acoustical phonons) connecting local breathing modes at neighboring sites [9].

Breathing modes can be decoupled by canonical transformations of their creation and annihilation operators, leading to a system with an effective electron-electron interaction and independent dispersive phonons [SB]:

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_{ph}, \quad (4)$$

$$\hat{H}_e = \sum_{i=1}^N (\varepsilon n_i - \alpha^2 n_i^2) - \alpha^2 \lambda \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j - \sum_{i,j} U_{ij} n_i n_j, \quad (5)$$

$$\hat{H}_{ph} = \sum_{\vec{q}} \sqrt{|1 - \lambda s(\vec{q})|} \left(\hat{a}_{\vec{q}}^+ \hat{a}_{\vec{q}} + \frac{1}{2} \right) \quad (6)$$

$$U_{ij} = \frac{a^2 \lambda^2}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{s^2(\vec{q})}{1 - \lambda s(\vec{q})} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)}, \quad (7)$$

$$s(\vec{q}) = \frac{1}{2} \sum_{j(i)=1}^z e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)}. \quad (8)$$

In the above summations, symbols $j(i)$ and $\langle i, j \rangle$ denote near-neighboring sites j for fixed i and pairs of neighbors respectively. The electron configuration is defined by $\{n_i\}$. The wave vector \vec{q} takes N values in the first Brillouin zone of the periodic structure formed by the Fe^{II} ions at the octahedral sites. Inversion symmetry has been assumed, so that $s(\vec{q}) = s(-\vec{q})$.

For weak inter-site coupling ($\lambda z < 2$) the quantity $1 - \lambda s(\vec{q})$ is positive and no soft modes are generated by the interaction. The average shift in equilibrium atomic positions due to a change in spin -state is proportional to [SA]:

$$\frac{\langle \hat{a}_i + \hat{a}_i^+ \rangle}{2} = \alpha \langle n_i \rangle + \frac{\alpha \lambda}{N} \sum_j \langle n_j \rangle \sum_{\vec{q}} \frac{s(\vec{q})}{1 - \lambda s(\vec{q})} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)}.$$

According to 5, the renormalized energy ε^* of e_g electron states and the effective in-site interaction u^* between them are given by:

$$\varepsilon^* = \varepsilon - \alpha^2 - \frac{\alpha^2 \lambda^2}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{s^2(\vec{q})}{1 - \lambda s(\vec{q})} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)},$$

$$u^* = -\alpha^2 - \frac{\alpha^2 \lambda^2}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{s^2(\vec{q})}{1 - \lambda s(\vec{q})} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)}.$$

Coupling to phonon modes lowers the energy of one electron states ($\varepsilon^* < \varepsilon$) and leads to attractive in-site interaction between them ($u^* < 0$) at least for weak inter-site coupling ($\lambda z < 2$). This favors local high spin states at finite temperatures. The interaction $-\alpha^2 \lambda$ between e_g electrons at neighboring sites is also attractive and leads to the collectivization of HS states.

On the other hand, the effective interaction U_{ij} between e_g electrons at arbitrary different sites is also attractive and short ranged for $\lambda z < 2$, oscillating and long ranged for intermediate coupling ($2 < \lambda z < 4$) and repulsive but short ranged in the strong coupling case ($\lambda z > 4$). For a cubic array with lattice parameter equal to one, in the long distance limit ($q \rightarrow 0$) one has:

$$U_{ij} = \frac{\alpha^2 \lambda^2 z^3}{4 - \lambda z} \frac{1}{N} \sum_q \frac{e^{i\vec{q}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)}}{q^2 + \kappa^2} \sim \frac{1}{4 - \lambda z} \frac{e^{-\kappa R_{ij}}}{R_{ij}},$$

$$\kappa^2 = \frac{2(2 - \lambda z)}{4 - \lambda z}.$$

The statistical sum for the electron system is:

$$Z = \sum_{\{n_i\}} \exp\left\{-\frac{H_e\{n_i\}}{KT}\right\} \prod_{i=1}^N g_{n_i}. \quad (9)$$

To incorporate into the Hamiltonian the degeneracy g_{n_i} of local states with n_i electrons e_g at site i , a procedure introduced in [14] for $n_i = 0, 1$ has been generalized to the case $n_i = 0, 1, 2$ [SC]:

$$H_e^*\{n_i\} = H_e\{n_i\} - kT \sum_{i=1}^N g_{n_i},$$

$$\sum_{i=1}^N \ln g_{n_i} = N \ln g_0 + \frac{1}{2} \ln\left(\frac{g_1^4}{g_0^3 g_2}\right) \sum_{i=1}^N n_i - \frac{1}{2} \ln\left(\frac{g_1^2}{g_2 g_0}\right) \sum_{i=1}^N n_i^2. \quad (10)$$

To explore the phase diagram let's introduce a free energy functional

$$\varphi[\{n_i\}, T] = \frac{H_e^*\{n_i\}}{N}.$$

In the thermodynamic limit, the minimum of $\varphi[\{n_i\}, T]$ is the exact free energy per site:

$$f(T) \equiv - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{kT}{N} \ln \sum_{\{n_i\}} \exp\left\{-\frac{H_e\{n_i\}}{KT}\right\} = \lim_{N \rightarrow \infty} \min \varphi[\{n_i\}, T]$$

The free energy functional can be also expressed in terms of the Fourier components:

$$n_i = \sum_q \tilde{n}(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_i}; \quad \tilde{n}(\vec{q}) = \frac{1}{N} \sum_i n_i(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_i}.$$

Then, up to an additive constant:

$$\varphi[\{\tilde{n}(\vec{q})\}, T] = \varepsilon_1 n - \varepsilon_2 n^2 - \sum_{q \neq 0} \varepsilon_2(\vec{q}) |\tilde{n}(\vec{q})|^2, \quad (11)$$

$$\varepsilon_1 = \varepsilon - \frac{kT}{2} \ln\left(\frac{g_1^4}{g_0^3 g_2}\right),$$

$$\varepsilon_2(\vec{q}) = \frac{\alpha^2}{1 - \lambda s(\vec{q})} - \frac{kT}{2} \ln\left(\frac{g_1^2}{g_2 g_0}\right),$$

$$n = \tilde{n}(0); \quad \varepsilon_2 = \varepsilon_2(0). \quad (12)$$

The first two terms of 11 give the free energy of a homogenous phase with average spin n and the last one is the contribution of spatial fluctuations.

III. PHASE DIAGRAM

For homogenous phases $n_i = n(0, 1, 2)$, and the free energy functional 11 reduces to:

$$\varphi[\{n_i = n\}, T] = \varepsilon_n = \varepsilon_1 n - \varepsilon_2 n^2. \quad (13)$$

The phase diagram is shown in figure 1. Low (LS), intermediate (IS) and high spin (HS) phases correspond to regions in the plane $\varepsilon_2 - \varepsilon_1$ where the absolute minimum of φ_n is obtained for $n = 0, 1, 2$ respectively. A point on the equilibrium lines correspond to a sequence of states where two phases coexist. The triple point can be reached only under the conditions $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$.

At $T = 0$ K only LS and HS phases can exist. The ground state is in the first (third) quadrant for $\lambda z < 2$ ($\lambda z > 2$), corresponding to a LS phase when $\varepsilon > (4\alpha^2)/(2 - \lambda z)$ and to a HS phase in the opposite case. As T increases at constant pressure, parameters ε_1 and ε_2 decrease along the isobars:

$$\varepsilon_1 = \varepsilon + \frac{4 \ln g_1 - 3 \ln g_0 - \ln g_2}{2 \ln g_1 - \ln g_0 - \ln g_2} \left(\varepsilon_2 - \frac{2\alpha^2}{2 - \lambda z} \right). \quad (14)$$

The slope of these straight lines depends only of the degeneracies of local states. Temperature induced first order transitions take place when the isobars 1 cross the phase equilibrium lines, as indicated in figure 1 for $g_0 = 1$; $g_1 = 9$; $g_2 = 15$.

When the ground state is HS (isobar-a in the phase diagram), there are no temperature induced phase transitions. For the LS ground state in the first quadrant, both one-step (isobar-b)) and two-step transitions (isobar-c) can take place, the last one under the condition:

$$\varepsilon > \frac{2\alpha^2}{2 - \lambda z} \frac{4 \ln g_1 - 3 \ln g_0 - \ln g_2}{2 \ln g_1 - \ln g_0 - \ln g_2}.$$

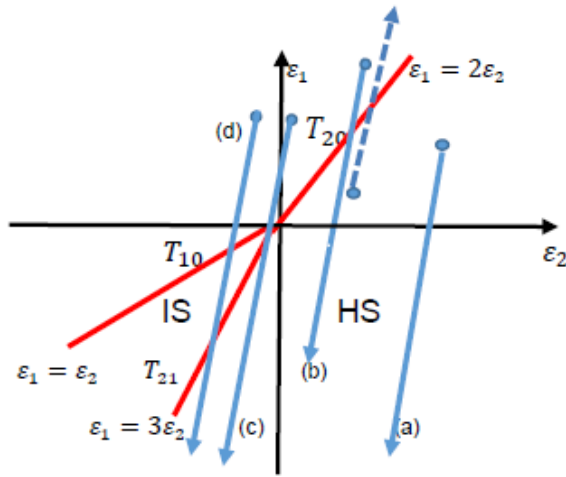


Figure 1. Phase diagram in the plane $\varepsilon_2 - \varepsilon_1$, showing high spin (HS), intermediate spin (IS) and low spin (LS) phases, the equilibrium curves (red lines) and the possible positions of the ground state (blue points). Arrows (a)-(d) indicate the evolution of phase points as temperature increases at constant pressure for $g_0 = 1$; $g_1 = 9$; $g_2 = 15$ and different positions of the ground state (small circles). The broken arrow qualitatively represent the evolution of the phase point as pressure increases at constant temperature.

When long-range interactions are present ($4 > \lambda z > 2$), the LS ground state is in the second quadrant and temperature-induced two-step transitions take place (isobar-d). This condition is sufficient but not necessary: two-step transitions can occur also in the absence of long range interactions (isobar-c).

Within this model, the occurrence of a IS homogeneous phase and two-steps transitions relies on the existence of excited states $t_{2g}^5 e_g^1$ with total spin $S = 1$ in an isolated complex [SA]. For an infinite system of coupled complexes, the phase with all Fe(II) atoms in $S = 1$ states will never represent the ground state, but it could be stabilized at non-zero temperature by the combined effect of interactions and entropy (it has larger degeneracy than the LS state). As shown in the diagram, this phase has the lower free energy for $0 > \varepsilon_2 > \varepsilon_1 > 3\varepsilon_2$. If the $S = 1$ local states are not considered, only HS and LS phases arise, separated by the straight line $\varphi_2 = 0$.

When only $n_i = 0, 2$ values are admitted, the effective electron Hamiltonian 10 can be reduced to an Ising model in the pseudo spin variables $\sigma_i = n_i - 1$, with a temperature dependent external field $h(T)$. The ferromagnetic Ising model with short range interactions has a first order phase transition between spin up and a spin down phases only for $h = 0$ and $T < T_c$ with T_c the Curie temperature. These two conditions set limits to the existence of the LS-HS transition and define its temperature T_{20} in terms of model parameters. However, the jump of the order parameter $\Delta n(T_{20}) < 2$ is different from the $\Delta n \approx 2$ observed in SCO systems. On the other hand, for the Ising model with near-neighbors interaction, the IS phase could only result from alternating spin order induced by antiferromagnetic coupling and could not coexist in the same material with the HS phase, which needs ferromagnetic coupling. So, Ising models with short range interactions do not describe the basic phenomenology of SCO. In reference [14] an Ising model with short and long range interactions, the latter treated in mean field

approximation, has been considered to discuss two-steps transitions in one-dimensional SCO chains.

The HS \leftrightarrow LS, HS \leftrightarrow IS, IS \leftrightarrow LS transition temperatures T_{20} , T_{21} , T_{10} are respectively:

$$\begin{aligned} kT_{20} \ln \left(\frac{g_2}{g_0} \right)^{1/2} &= \varepsilon - \frac{4\alpha^2}{2 - \lambda z} \\ , kT_{21} \ln \left(\frac{g_2}{g_1} \right)^{1/2} &= \varepsilon - \frac{6\alpha^2}{2 - \lambda z}, \\ kT_{10} \ln \left(\frac{g_1}{g_0} \right)^{1/2} &= \varepsilon - \frac{42\alpha^2}{2 - \lambda z}. \end{aligned} \quad (15)$$

For $\varepsilon = 1600 \text{ cm}^{-1}$, $\hbar\omega = 180 \text{ cm}^{-1}$ and taking $\alpha = 1$; $\lambda = 0.25$; $z = 6$ a reasonable HS \leftrightarrow LS transition temperature $T_{20} = 170 \text{ K}$ is obtained from 15.

As previously stated, all energy parameters have been expressed in units of the local breathing mode energy $\hbar\omega$. In ordinary units one has:

$$\varepsilon_2 = \frac{2\alpha^2 \hbar\omega}{2 - \lambda z} - \frac{kT}{2} \ln \left(\frac{g_1^2}{g_2 g_0} \right).$$

In the framework of this simple model $\alpha, \lambda, \omega, \varepsilon$ are intuitively expected to increase with pressure. Then, parameters ε_1 and ε_2 are also growing functions of pressure. On the other hand, combining 13 with general thermodynamics:

$$\left(\frac{\partial \varepsilon_1}{\partial p} \right)_T n - \left(\frac{\partial \varepsilon_2}{\partial p} \right)_T n^2 = \left(\frac{\partial f}{\partial p} \right)_T \geq 0.$$

Consequently, for $n = 1, 2$ as pressure increases at constant temperature ε_1 grows faster than ε_2 and the system always approaches lower spin phases. The qualitative evolution of the phase point as been represented in the phase diagram with a discontinuous arrow. Determining the exact equation of these isotherms requires the specification of the (unknown in this description) pressure dependence of parameters ε_1 and ε_2 . Increasing pressure increases transition temperatures. Pressure induced transitions HS \leftrightarrow LS could take place for systems with a HS ground state, which do not experience temperature induced transitions, as experimental evidence shows [1] and the phase diagram illustrates. Dimensionality enters the phase diagram through the number of near neighbors z . A larger z is equivalent to a stronger coupling between neighboring breathing modes and favors HS states. Consider, for example, layered materials obtained by assembling planes of coupled octahedral complexes separated by organic linkers. As inter-plane coupling is weak, the ground state moves to the LS region $\varepsilon > (4\alpha^2 \hbar\omega)/(2 - \lambda z)$ and the quasi 2D systems ($z = 4$) can show SCO even when their 3D counterpart ($z = 6$ without the organic linker) is always in the HS state. This behavior has been observed in layered Fe nitroprussides [15]. If there is SCO in the 3D system, it is expected to take place at a higher temperature in the layered version.

The phase diagram previously presented could be modified by considering non-homogeneous phases, which means

considering the contribution of the last term in expression 11 for the free energy functional. According to 11 and 12, one has $\varepsilon_2(\vec{q}) < \varepsilon_2 < 0$ for $\lambda z > 2$. In this case, spatial fluctuations always increase the free energy and disappear from the minimum configuration. This means that for phase points in the third and fourth quadrants local order is preserved without spatial fluctuations across the crystal.

On the contrary, in the weak coupling case, when $\varepsilon_2 > 0$ so that $\varepsilon_2(\vec{q}) > 0$, at least for small q , long range fluctuations lower the free energy and could destroy the homogeneous phase. Fortunately, the free energy functional with fluctuations included has a lower bound given by:

$$\begin{aligned} \varphi &= \varphi_n - \sum_{\vec{q} \neq 0} \varepsilon_2(\vec{q}) |\tilde{n}(\vec{q})|^2 > \varphi_n - \varepsilon_2 \sum_{\vec{q} \neq 0} |\tilde{n}(\vec{q})|^2 \\ &= \varphi_n - \varepsilon_2 \left(\frac{1}{N} \sum_i n_i^2 - n^2 \right) \geq \varepsilon_1 n - 4\varepsilon_2. \end{aligned}$$

It follows that:

$$\text{mín}(\varepsilon_1 n - 4\varepsilon_2) \leq \text{mín}(\varphi) \leq \text{mín}(\varphi_n). \quad (16)$$

In the fourth quadrant of the phase diagram ($\varepsilon_1 < 0$; $\varepsilon_2 > 0$) the only possible minimum of the free energy functional consistent with 16 is obtained for $n = 2$ and $\varepsilon = \varepsilon_2$, which corresponds to a stable high temperature HS phase for:

$$T = \frac{2\varepsilon}{k(4 \ln g_1 - 3 \ln g_0 - \ln g_2)}$$

As temperature decreases below this value and the phase point moves to the first quadrant ($\varepsilon_1 > 0$; $\varepsilon_2 > 0$), the minimum of the free energy functional can be reached for average spin values different from those corresponding to homogeneous phases with $n = 0, 2$, as shown in figure 2.

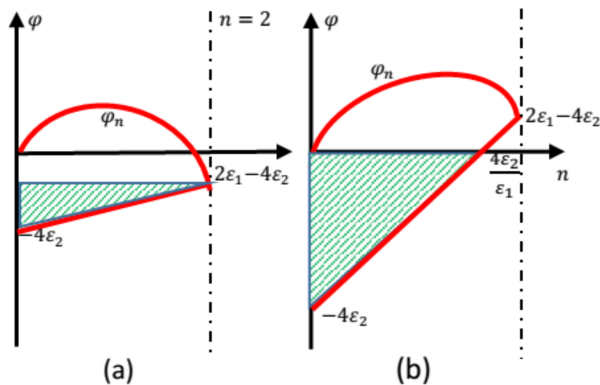


Figure 2. In the first quadrant of the phase diagram ($\varepsilon_1 > 0$; $\varepsilon_2 > 0$), the minimum of the Landau free energy φ lies in the shadowed region between the straight line $\varepsilon_1 n - 4\varepsilon_2$ and the curve $\varphi_n = \varepsilon_1 n - \varepsilon_2 n^2$ (both in red) (a) $T > T_{20}$; (b) $T < T_{20}$

In the HS phase (figure 2a), configurations with different average spin and nearly equal free energy are unstable, which combined with large relaxation times, needed to change the spin state of a macroscopic fraction of the ions in the

sample, can lead to hysteresis. Notice that for the system in the state $n=0$ there is a free energy barrier to transit to the equilibrium state $n = 2$. At temperatures lower than the mean field transition temperature T_{20} (figure 2b) the minimum free energy can be reached for any average spin value $n \leq (4\varepsilon_2)/\varepsilon_1$ which, again combined with large relaxation times, can also lead to hysteresis and incomplete transitions at very low temperatures. Notice now for the system with $n = 2$ there is a free energy barrier to transit to the equilibrium value $n = 0$. The description of these phenomena requires full consideration of spin fluctuations and can be approached with the aid of Monte Carlo simulations.

The model presented in this paper could also be applied to discuss SCO in nanoparticles [16]. However, it must be emphasized that the minimum of the free energy functional corresponds to the exact free energy per site only in the thermodynamic limit. For small samples, fluctuations with respect to that minimum and boundary conditions play a very important role and should be considered. Model extensions to evaluate lattice entropy changes during transitions, an important experimental fingerprint of SCO not considered here, are also possible. Local fields describing the interaction between spin centers in binuclear SCO compounds and other effects of the chemical environment can be also incorporated to the model.

IV. CONCLUSIONS

A simple model of e_g electrons at octahedral sites interacting with local breathing modes coupled to its near neighbors, accounts for the basic phenomenology of spin crossover in molecular crystals formed with Fe (II) complexes. The effective electron-electron interaction can be short or long ranged, attractive or repulsive, depending on inter-site coupling and site connectivity. An exact analytic expression for the free energy functional has been derived. A diagram has been obtained for homogeneous phases and the transition temperatures have been calculated in terms of model parameters. Two-step transitions are possible for systems with both, short range and long range interactions. Instability with respect to spatial fluctuations appears near the HS↔LS transition, which combined with large relaxation times can lead to hysteresis and incomplete transitions. .

SUPPLEMENTARY INFORMATION

Details of long demonstrations contained in supplements SA, SB and SC are freely available on-line.

ACKNOWLEDGEMENTS

CRC and YMP acknowledge the support of CONACyT through scholarships for a sabbatical year and MSc study program respectively. This study was partially supported by the CONACyT projects 2013-05-231461 and CB-2014-01-235840.

REFERENCES

- [1] P. Gütllich and H. A. Goodwin, Eds. Spin crossover in transition metal compounds I, II, III. Springer series "Topics in current Chemistry" Vol. 233-235 (2004).
- [2] M.A. Halcrow. Spin-crossover materials: properties and applications (John Wiley and Sons, 2013).
- [3] P. Gütllich, A.B. Gaspar and Y. García, *Bellstein J. Org. Chem.* **9**, 342 (2013)
- [4] C. Kohler, R.Jakobi, E.Meissner, L.Wiehl, H.Spierung, P.Gütllich, *J. of Phys. Chem. Solids* **51**, 239 (1990).
- [5] C. M. Jureschi, J. Linares, A. Rotaru, M. H. Ritti, M. Parlier, M. M. Dîrtu, M. Wolff, and Y. Garcia, *Sensors*, **15**, 2388 (2015).
- [6] D. Chernyshov, H.-B. Burgi, M. Hostettler and K.W. Tornroos, *Phys. Rev. B*, **70**, 094116 (2004).
- [7] J. Wajnsflasz and R. Pick, *J. Phys. Colloq.*, **32**, 1 (1971).
- [8] A. I. Nesterov, Y.S. Orlov, S. G. Ovchinnikov and S. V. Nikolaev, *Phys. Rev. B*, **96**, 134103 (2017).
- [9] A. Palii, S. Ostrovsky, O. Reu, B. Tsukerblat, S. Decurtins, Shi-Xia Liu, and S. Klokishner, *The Journal of Chemical Physics*, **143**, 084502 (2015).
- [10] T. Kambara, *J. Chem. Phys.* **70**, 4199 (1979).
- [11] T. Kambara, *J. Chem. Phys.* **74**, 4557 (1981).
- [12] A. Palii, S. Ostrovsky, O. Reu, B. Tsukerblat, S. Decurtins, Shi-Xia Liu, and S. I. Klokishner. *J. Phys. Chem. C* **120**, 14444 (2016).
- [13] S. Klokishner, J. Linares, and F. Varret, *Chem. Phys.* **255**, 317 (2000).
- [14] D. Chiruta, J. Linares, P. R. Dahoo and M. Dimian, *J. Appl. Phys.* **112**, 074906 (2012).
- [15] V. Niel, J. M. Martínez-Agudo, M. C. Muñoz and J. A. Real, *Inorg. Chem.* **40**, 3838 (2001).
- [16] T. Kawamoto and S. Abe, *Chem. Commun.* **31**, 3933 (2005).

This work is licensed under the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0, <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0>) license.



GENERACIÓN DE SEGUNDO Y TERCER ARMÓNICO EN NANO-ESTRUCTURAS CON POTENCIAL DE CONFINAMIENTO ASIMÉTRICO: EL PAPEL DE LA APROXIMACIÓN DE ÁTOMO DE DOS NIVELES)

SECOND-HARMONIC AND THIRD-HARMONIC GENERATION IN NANOSTRUCTURES WITH ASYMMETRIC CONFINEMENT POTENTIAL: THE ROLE OF TWO-LEVEL ATOM APPROXIMATION

D. CAUSIL^a, M. URANGO-BAQUERO^b Y A. PORTACIO^{c†}

a) Facultad de Ciencias Básicas, Ingeniería y Arquitectura, Corporación Universitaria del Caribe, Sincelejo, 700001 Sucre, Colombia

b) Instituto de Ciencias Ambientales de la Orinoquia Colombiana-ICAOC, Universidad de los Llanos, 500001 Villavicencio

c) Facultad de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad de los Llanos, 500001 Villavicencio, Colombia; aportacio@unillanos.edu.co[†]

† autor para la correspondencia

Recibido 24/7/2018; Aceptado 24/9/2018

Se estudia teóricamente la generación de segundo armónico (SHG) y la generación de tercer armónico (THG) en un punto cuántico cilíndrico (CQD) con potencial de confinamiento asimétrico, en el marco de la aproximación de sistema cuántico de dos niveles y el formalismo matriz densidad. Las energías y las funciones de onda para un electrón en el CQD se obtuvieron solucionando la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Los cálculos numéricos se efectúan para un CQD de GaAs/GaAlAs. Se encontró el aumento del confinamiento de los portadores de carga producido por el aumento del campo magnético y/o las dimensiones de la nanoestructura generan un corrimiento al azul en las energías de transición de los electrones. También se encontraron resonancias múltiples asociadas con transiciones entre el estado excitado y el estado base y otras transiciones asociadas a cambios en los momentos dipolares permanentes.

The second harmonic generation (SHG) and third harmonic generation (THG) into a cylindrical quantum dot (CQD) with asymmetric confinement potential is studied theoretically within the framework the two-level atom approximation, by using the matrix density formalism. The energy levels and waves functions of an electron into CQD they were obtained by solving the time-independent Schrödinger equation. The numerical calculations make for a CQD of GaAs/GaAlAs. It was found that the increase in the confinement of the charge carriers produced by the increase of the magnetic field and/or the dimensions of the nanostructure generates a shift to blue in the transition energies of the electrons. Also a multiple resonances in the two-level atom approximation was found. These were associated with transition between excited state and ground state and a second transition getting a change permanent dipole moment.

PACS: Nonlinear optics (Óptica no lineal), 42.65.-k; Second harmonic generation (Generación de segundo armónico), 42.65.Ky

I. INTRODUCCIÓN

Los avances en las tecnologías de crecimiento de materiales han permitido producir nano-estructuras con diferentes formas y tamaños [1–3]. Un efecto inherente de las nano-estructuras es el aumento de la intensidad en la repuesta óptica de estos nano-materiales producida por el aumento del confinamiento cuántico de los portadores de carga [4]. Esto ha motivado investigaciones teóricas y/o experimentales sobre la respuesta óptica en nano-estructuras que incluyen el estudio fenómenos ópticos tales como: absorción óptica [5], rectificación óptica (OR) [6], SHG [7] y THG [8]. Dentro de estos fenómenos ópticos no lineales la SHG y la THG son de gran interés principalmente por sus aplicaciones en la producción de imágenes diagnosticas no invasivas en muestras biológicas de alta resolución espacial y alto contraste a través de técnicas de microscopía [9–12].

Por otra parte, en el año de 1961 P. Franken *et. al.*, [13] realizaron la primera demostración experimental de SHG y concluyeron que la SHG es un proceso óptico no-lineal

de segundo orden donde un material no-centrosimétrico convierte parte de la luz incidente en luz con el doble de la frecuencia. La THG es un proceso análogo a la SHG con la diferencia que la THG ocurre sin importar la simetría del medio y hace referencia a la producción de una señal que triplica la frecuencia de la luz incidente [14].

Cabe anotar que entre las propiedades ópticas no lineales, las de segundo orden juegan un papel esencial por ser su magnitud generalmente mayor con respecto a los órdenes superiores cuando el sistema presenta cierta asimetría. Recientemente se han reportados trabajos donde producen asimetrías aplicando un campo eléctrico estacionario al sistema y/o confinando los portadores de carga, mediante potenciales asimétricos [15,16].

En el procedimiento teórico para el cálculo de la repuesta óptica en nanoestructuras generalmente se requieren tres niveles de energía para la SHG y al menos cuatro niveles de energía para la susceptibilidad de THG; sin embargo existen reportes [17–20], donde se han realizado cálculos teóricos de SHG y THG en la aproximación de sistema cuántico de

dos niveles en nanoestructuras con polaridad permanente. Es importante aclarar que aunque existen muchos estados propios de energía en un medio atómico, molecular o de estado sólido, para el cálculo de la susceptibilidad óptica, es conveniente utilizar la aproximación de sistema cuántico de dos niveles siempre que la frecuencia del campo óptico es cercana o igual a una de las frecuencias de transición entre dos niveles del sistema. El resto de los niveles cuánticos se convierten en un reservorio para los dos niveles resonantes con el campo óptico incidente y permiten la descripción fenomenológica de procesos disipativos. Para un sistema cuántico de dos niveles existen dos medidas de decoherencia, T_1 y T_2 . El tiempo T_1 se denomina tiempo de decoherencia longitudinal o tiempo de emisión espontánea y mide la pérdida de energía del sistema. El tiempo T_2 se denomina tiempo de coherencia transversal o tiempo de coherencia de fase, o el tiempo de dispersión elástica. Generalmente $T_1 > T_2$ y sus valores se obtienen de resultados experimentales.

II. TEORÍA

El sistema cuántico estudiado consiste de un electrón confinado en CQD de GaAs/AlGaAs en presencia de un campo magnético uniforme \mathbf{B} orientado en la dirección axial del CQD. En el marco de la aproximación de masa efectiva el Hamiltoniano \hat{H}_0 del sistema está dado por:

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m^*} \left(\hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V_{conf}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

donde m^* es la masa efectiva, $\hat{\mathbf{P}}$ es el operador momento lineal, e es la carga fundamental, c es la velocidad de la luz

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \psi - \frac{i\hbar\omega_c}{2} \frac{\partial \psi}{\partial \phi} + \frac{m^* \omega_c^2 \rho^2}{8} \psi + \frac{m^* \omega_\rho^2 \rho^2}{2} \psi + \frac{m^* \omega_z^2 z^2}{2} \psi + \alpha \frac{m^* \omega_z^2 z^3}{2L} \psi = E\psi \quad (5)$$

donde $\omega_c = eB/(m^*c)$ es la frecuencia de ciclotrón. La solución de la Ec. 5 está descrita en Ecs. 6-8:

$$\psi_{m,n_\rho,n}(\rho, \phi, z) = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{a^{1+|m|}} \left[\frac{(|m| + n_\rho)!}{2^{|m|n_\rho}|m|!} \right]^{1/2} e^{im\phi} e^{-\frac{\rho^2}{4a^2}} \rho^{|m|} F(-n_\rho, |m| + 1, \frac{\rho^2}{2a^2}) g_n^{(0)}(z) + \frac{\alpha m^* \omega_z}{2L\hbar} \left[\frac{\hbar}{2m^* \omega_z} \right]^{3/2} \times \\ \times \left(-\frac{\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}}{3} g_{n+3}^{(0)}(z) + \frac{\sqrt{(n)(n-1)(n-2)}}{3} g_{n-3}^{(0)}(z) - 3(n+1)^{3/2} g_{n+1}^{(0)}(z) + 3(n)^{3/2} g_{n-1}^{(0)}(z) \right) \quad (6)$$

$$E(m, n_\rho, n) = \hbar \sqrt{\omega_c^2 + \omega_\rho^2} \left(n_\rho + \frac{|m| + 1}{2} \right) + \frac{m\hbar\omega_c}{2} + \hbar\omega_z \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{(\alpha\hbar)}{4m^*L^2} \left[\frac{15}{4} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{7}{16} \right] \quad (7)$$

$$\text{donde, } a = \sqrt{\frac{\hbar/m^*}{\omega_c^2 + 4\omega_\rho^2}} \text{ y}$$

$$g_n^{(0)}(z) = \left(\frac{m^* \omega_z}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{m^* \omega_z z^2}{\hbar}} H_n \left(\sqrt{\frac{m^* \omega_z}{2\hbar}} z \right), \quad (8)$$

donde, m , n_ρ , n son los números cuánticos, magnético, radial, azimutal respectivamente, $F(a, b, x)$ es la función hipergeométrica confluyente, $H_n(x)$ son los polinomios de Hermite. Los detalles para la solución de la Ec. 5 se

en el vacío, \mathbf{A} es el vector potencial del campo magnético uniforme, el cual se puede escribir como $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = 1/2\mathbf{B} \times \mathbf{r}$ con $\mathbf{B} = B\mathbf{z}$ y en coordenadas cilíndricas se convierte en $A_\rho = A_z = 0$, $A_\phi = 1/2B\rho$. $V_{conf}(r)$, es un potencial de confinamiento finito, el cual incluye potenciales parabólicos tanto en dirección radial como a lo largo de z y un término asimétrico en la coordenada z ; como se muestra a continuación:

$$V_{conf}(\mathbf{r}) = V_{conf}(\rho, \phi, z) = V_\rho(\rho) + V_z(z). \quad (2)$$

Las expresiones para $V_\rho(\rho)$ y $V_z(z)$ son:

$$V_\rho(\rho) = \begin{cases} \frac{m^* \omega_\rho^2 \rho^2}{2}, & \rho \leq R \\ V_0, & \rho > R \end{cases} \quad (3)$$

$$V_z(z) = \begin{cases} \frac{m^* \omega_z^2 z^2}{2} + \alpha \frac{m^* \omega_z^2 z^3}{2L}, & |z| \leq \frac{L}{2} \\ V_0, & |z| \geq \frac{L}{2} \end{cases} \quad (4)$$

donde $\omega_\rho \sim \hbar/m^*R^2$ y $\omega_z \sim \hbar/m^*L^2$, con R y L el radio y la longitud del cilindro respectivamente, V_0 es la altura de la barrera de potencial, que corresponde a la diferencia de las bandas de conducción del material (GaAs) y el material circundante ($\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$), el valor de V_0 depende de la concentración x de Al. α es un parámetro adimensional que indica la intensidad de la perturbación asimétrica. La ecuación de Schrödinger en coordenadas cilíndricas tiene la forma:

encuentran en las referencias [21, 22]. En este artículo se consideran los primeros 2 estados cuánticos del electrón confinado en el CQD, los cuales están definidos por los números cuánticos (m, n_ρ, n) .

Después de obtener las energías E_k y las funciones de onda $\Psi_k = \psi_{k=(m,n,p,m)}(\rho, \varphi, z)$ para cada estado k del electrón en el CQD, el sistema cuántico es excitado con un campo óptico $E(t) = \tilde{E}e^{-i\omega t} + \tilde{E}^*e^{i\omega t}$, donde ω es la frecuencia de campo externo incidente, \tilde{E} la amplitud del campo óptico espacialmente homogéneo, en el marco de la aproximación de onda larga. La polarización eléctrica inducida $P(t)$ en el CQD debido a la interacción con el campo óptico $E(t)$ es:

$$P(t) = \varepsilon_0(\chi^{(1)}\tilde{E}e^{-i\omega t} + \chi^{(2)}|\tilde{E}|^2 + \chi_{2\omega}^{(2)}\tilde{E}^2e^{-i2\omega t} + \chi_{3\omega}^{(3)}\tilde{E}^3e^{-i3\omega t}) + cc., \quad (9)$$

donde, $\chi^{(1)}$, $\chi_0^{(2)}$, $\chi_{2\omega}^{(2)}$, $\chi_{3\omega}^{(3)}$ son la susceptibilidad óptica lineal, la rectificación óptica, generación de segundo armónico y generación de tercer armónico respectivamente y ε_0 es la permitividad del vacío. Usando el método de matriz de la densidad y el procedimiento iterativo descrito en las Refs. [24,25], se obtienen expresiones para las susceptibilidades de segundo orden que se indica a continuación [17–20]:

$$\chi_0^{(2)}(\omega) = \frac{4\sigma_v M_{12}^2 \delta_{12} \left(E_{21}^2 \left[1 + \frac{T_1}{T_2} \right] + \left[(\hbar\omega)^2 + \left(\frac{\hbar}{T_2} \right) \left[\frac{T_1}{T_2} - 1 \right] \right] \right)}{\varepsilon_0 \left[(E_{21} - \hbar\omega)^2 + \left(\frac{\hbar}{T_2} \right)^2 \right] \left[(E_{21} + \hbar\omega)^2 + \left(\frac{\hbar}{T_2} \right)^2 \right]}, \quad (10)$$

$$\chi_{2\omega}^{(2)}(\omega) = \frac{\sigma_v \delta_{12} |M_{12}|^2}{\varepsilon_0 (E_{21} - \hbar\omega - i\hbar\Gamma_0)(E_{21} - 2\hbar\omega - i\hbar\Gamma_0)}, \quad (11)$$

$$\chi_{3\omega}^{(3)}(\omega) = \frac{\sigma_v \delta_{12}^2 |M_{12}|^2}{\varepsilon_0 (E_{21} - \hbar\omega - i\hbar\Gamma_0)(E_{21} - 2\hbar\omega - i\hbar\Gamma_0)(E_{21} - 3\hbar\omega - i\hbar\Gamma_0)}, \quad (12)$$

donde σ_v es la densidad de electrones en el CQD, $E_{21} = E_2 - E_1$ es la energía de transición del estado Ψ_f al estado Ψ_i , $M_{ij} = \langle \Psi_j | e_z | \Psi_i \rangle$ es el elemento de matriz del momento dipolar eléctrico de transición (se ha considerado la polarización del campo óptico en la dirección z), $\hbar\omega$ es la energía del fotón incidente, $\delta_{if} = |M_{ff} - M_{ii}|$, $\Gamma_0 = 1/T_2$, con T_1 y T_2 los tiempos de relajación del sistema longitudinal y transversal respectivamente.

III. RESULTADOS Y ANÁLISIS

En esta sección, se presentan los resultados para la SHG y la THG producidos en un CQD de AsGa/AsGaAl. Para realizar los cálculos se usaron los siguientes parámetros: masa efectiva del electrón $m^* = 0.067m_0$ (m_0 es la masa del electrón libre), $T_1 = 1$ ps, $T_2 = 0.2$ ps, $n_r = 3.2$, $\sigma_v = 5 \times 10^{24} \text{ m}^{-3}$ y 40% de concentración de Al para el cual la barrera de potencial es $V_0 = 316$ meV [23,24].

La Figura 1(A), muestra la SHG $\chi_{2\omega}^{(2)}$ como una función de la energía del fotón incidente para tres valores del campo magnético, $B = 0$ T (curva azul), $B = 10$ T (curva morada), $B = 20$ T (curva roja) para un CQD con $R = 5$ nm y $L = 10$ nm. Se observa que los picos de resonancia para susceptibilidad de SHG se desplazan hacia el azul con el aumento del campo magnético, este comportamiento se debe a que la intensidad del campo magnético proporciona un término de confinamiento magnético parabólico adicional.

Bajo este confinamiento magnético adicional, el valor de la energía de transición en la sub-banda del CQD aumenta.

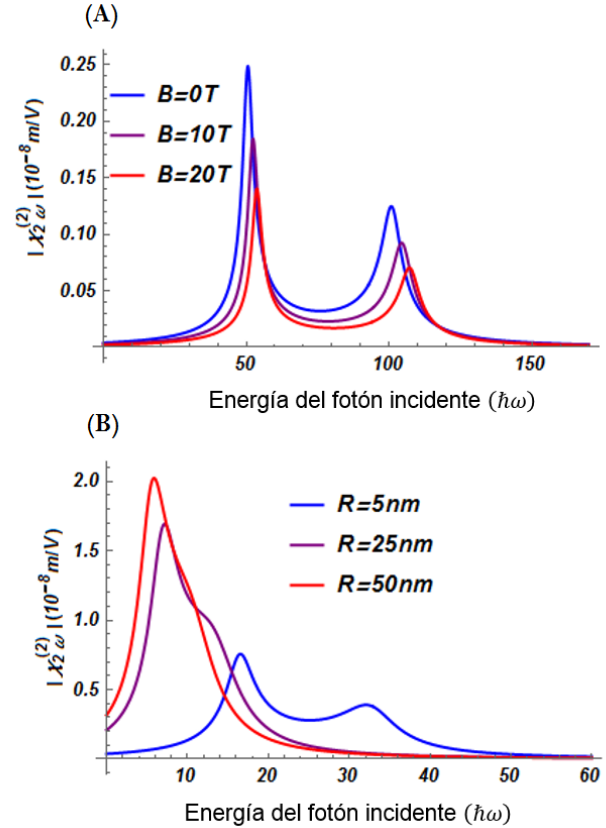


Figura 1. SHG como una función de la energía del fotón incidente para un CQD con $R = 5$ nm y $L = 10$ nm: (A) para tres valores del campo magnético, $B = 0$ T (curva azul), $B = 10$ T (curva morada), $B = 20$ T (curva roja). (B) para tres valores del radio del CQD, $R = 5$ nm (curva azul), $R = 25$ nm (curva morada), $R = 50$ nm (curva roja).

La Figura 1(B), muestra la SHG $\chi_{2\omega}^{(2)}$ como una función de la energía del fotón incidente para tres valores del radio del CQD, $R = 5$ nm (curva azul), $R = 25$ nm (curva morada), $R = 50$ nm (curva roja) para un CQD con $L = 10$ nm. Se observa que el aumento del tamaño del CQD produce ancho del pico resonante sea más grande y por ello se observa un solo pico resonante, la razón física de este comportamiento es porque la disminución del confinamiento de los electrones producida por el aumento del tamaño del CQD, disminuye sus energías de transición y aumenta de las áreas extendidas en sus funciones de onda.

La Figura 2(A), muestra la THG $\chi_{3\omega}^{(3)}$ como una función de la energía del fotón incidente para tres valores del campo magnético, $B = 0$ T (curva azul), $B = 10$ T (curva morada), $B = 20$ T (curva roja) para un CQD con $R = 5$ nm y $L = 10$ nm y en la Figura 2(B), se muestra la THG $\chi_{3\omega}^{(3)}$ como una función de la energía del fotón incidente para tres valores del radio del CQD, $R = 5$ nm (curva azul), $R = 25$ nm (curva morada), $R = 50$ nm (curva roja) para un CQD con $L = 10$ nm. Se observa en estas figuras que el aumento existe un corrimiento al azul en los picos resonantes cuando aumenta el confinamiento geométrico y/o el confinamiento magnético y las razones físicas son las mismas que para la Figura 1.

Por último se también se observa en las Figs. 1 y 2, resonancias múltiples aún en la aproximación de sistema cuántico de dos niveles, estas resonancias múltiples ya han sido analizados por criterios de microscopia óptica [25] de la siguiente forma: i) Los términos proporcionales a δ_{12} en las Ecs. 11 y 12 están asociados con transiciones entre el estado excitado y el estado base y una segunda transición que implica el cambio en los momentos dipolares permanentes.

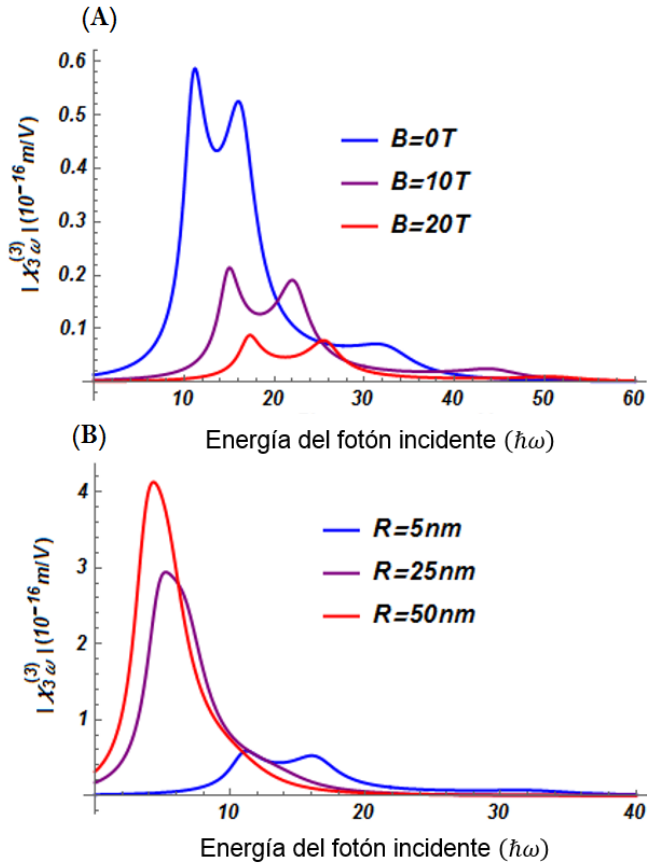


Figura 2. THG como una función de la energía del fotón incidente para un CQD con $R = 5\text{ nm}$ y $L = 10\text{ nm}$: (A) para tres valores del campo magnético, $B = 0\text{ T}$ (curva azul), $B = 10\text{ T}$ (curva morada), $B = 20\text{ T}$ (curva roja). (B) para tres valores del radio del CQD, $R = 5\text{ nm}$ (curva azul), $R = 25\text{ nm}$ (curva morada), $R=50\text{ nm}$ (curva roja).

IV. CONCLUSIONES

En este artículo, se calcularon las energías y las correspondientes funciones de onda para el estado base y primer estado excitado de un electrón confinado en CQD de $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$ en presencia de un campo magnético uniforme \mathbf{B} orientado en la dirección axial del CQD. Se encontró que aún en la aproximación de sistema cuántico de dos niveles existen resonancias múltiples, con lo cual un sistema que presente algún tipo de asimetría puede producir SHG y THG. También se encontró que el aumento del confinamiento geométrico y/o el confinamiento magnético produce un corrimiento al azul en los picos resonantes que presentan las señales de SHG y THG.

En resumen se encontró que el campo magnético y el tamaño de la nano-estructura juegan un papel importante

en las propiedades ópticas no lineales que presenta los semiconductores de baja dimensionalidad abriendo así nuevas oportunidades para la exploración práctica del efecto cuántico de tamaño y/o la acción de agentes externos en los dispositivos

AGRADECIMIENTOS

A. Portacio, reconoce el apoyo financiero de Universidad de los Llanos, bajo el proyecto "Cálculo de la respuesta óptica en nano-estructuras usando una ecuación maestra en la forma Lindblad" código C01-F02-010-2017.

D. Causil, agradece a la Corporación Educativa del Caribe "CECAR" por apoyar esta investigación básica en el campo de las ciencias físicas a través del patrocinio económico del proyecto de convocatoria interna AM5200101 - 281 - 2016.

REFERENCIAS

- [1] C. Tan, and H. Zhang, J. Am. Chem. Soc. 137, 12162 (2015).
- [2] Z. A Gacevic, D. Gomez Sanchez, and E. Calleja, Nano Lett. 15, 1117 (2015).
- [3] A. Surrente, R. Carron, P. Gallo, A. Rudra, B. Dwir and E. Kapon. Nano Research. 9, 3279, (2016).
- [4] M. Vahdani, Superlattices Microstruct. 76, 326 (2014).
- [5] M. Kouhi, Int. J. Mod. Phys. B. 31, 1750164 (2017).
- [6] H. Bahramiyan. Opt. Mater. 75, 187 (2018).
- [7] J. Wang, Y. Yu, Y. Wei, S. Liu, J. Li, Zhang-Kai Zhou, Z. Niu, S. Yu and X. Hua. Sci. Rep. 7, 2166 (2017).
- [8] R. Khordad, R. Opt. Commun. 391, 121 (2017).
- [9] B. Weigelin, *et. al*, J. Cell Sci. 129, 245 (2016).
- [10] C. Wu, T. Wang, C. Hsieh, S. Huang, J. Lin, S. Hsu, H. Wu, Y. Wu and T. Liu, Sci Rep. 6, 37210 (2016).
- [11] K. Tilbury and P.J. Campagnola, Perspect. Medicin Chem. 7, 21 (2015).
- [12] M. Han, G. Giese, and J.F. Bille, Opt. Express 13, 5791 (2005).
- [13] P. A. Franken, A. Hill, C. Peters, and G. Weinreich, Phys. Rev. Lett. 7, 118 (1961)
- [14] B.E Saleh, M.C. Teich, and B.R. Masters, J. Biomed. Opt. 13, 049901 (2008).
- [15] M. Olsen. Phys. Rev. A 88, 051802 (2013).
- [16] W. Xie, J. Lumin. 131, 943 (2011).
- [17] M.G. Kuzyk, K.D. Singer, and G.I. Stegeman, Adv Opt. Photonics. 5, 4 (2013).
- [18] L. Tsang, D. Ahn, and S. Chuang, Appl. Phys. Lett. 52, 697 (1988).
- [19] M. Zaluzny, Acta Phys. Pol. A. 90, 1118 (1996).
- [20] M. Zal, Phys. Rev. B 51, 9757 (1995).
- [21] A. A. Portacio, A.F. Jiménez, and M. Urango, Inf. Tecnol.. 27, 285 (2016)
- [22] A. A. Portacio, Jimenez, and M. Urango, Rev. Mex. Fis. 62, 330 (2016).
- [23] A. A. Portacio, B.A. Rodríguez, and P. Villamil, Physica B: Condensed Matter, 511, 68 (2017).

- [24] A. A. Portacio, A.A., B.A. Rodríguez, and P. Villamil, Superlattices Microstruct. 113, 550 (2018).
[25] T. Aartsma and J. Matysik, Biophysical techniques in

photosynthesis. (Vol. 2. Springer Science & Business Media, 2008), pp. 35-54.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0, <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0>) license.



CARACTERIZACIÓN DE LA CINÉTICA DEL SECADO SOLAR EN HOJAS DE TILO (JUSTICIA PECTORALIS JACQ VAR. PECTORALIS)

CHARACTERIZATION OF THE SOLAR DRYING KINETIC IN TILE LEAVES (JUSTICIA PECTORALIS JACQ VAR. PECTORALIS)

Y.O. HERNÁNDEZ, A. SOCORRO[†], S. CALDERÓN Y M. VEGA

Instituto de Investigaciones Fundamentales en Agricultura Tropical "Alejandro de Humboldt" INIFAT, dpfisiologia@inifat.co.cu[†]

[†] autor para la correspondencia

Recibido 24/7/2018; Aceptado 24/9/2018

En el secado solar las propiedades físico-químicas y la geometría del producto, son factores determinantes en la cinética de secado e influyen en la velocidad del proceso. Este trabajo presenta un modelo para evaluar la cinética del secado solar, en hojas de tilo (*Justicia pectoralis* Jacq var. *pectoralis*) y su validación experimental. El ajuste matemático de las curvas corroboró que el modelo propuesto, describe la dinámica de extracción. Se comprobó que en este tipo de tecnología, a pesar de los bajos valores de los coeficientes de difusión y la energía de activación, se genera un gradiente térmico en el interior de la cámara, que permite la deshidratación de las hojas sin afectar sus propiedades medicinales.

In solar drying, the physical-chemical properties and the geometry are determining factors in the drying kinetics and they influence in process speed. A model to evaluating the solar drying kinetic process was presented for tile leaves (*Justicia pectoralis* Jacq var. *pectoralis*), as well as its experimental validation. The mathematical fitting of the curves corroborated that the proposed model describes the water extraction kinetic. Despite low values of diffusion coefficients and activation energy, this technology allows to prove the adequate thermal gradient into the chamber to contributing the leaf dehydration without the medical properties affectation.

PACS: Flow through (Flujo a través), 47.63.Jd; Molecular dynamics calculations in biological physics (Cálculos de dinámica molecular en física biológica), 87.10.Tf, 87.15.ap; Partial differential equations (Ecuaciones diferenciales parciales en aspectos matemáticos de la física biológica); Water transportation (Transporte de agua), 89.40.Cc

I. INTRODUCCIÓN

El secado solar es una de las técnicas más difundidas en la deshidratación de plantas medicinales y aromáticas, ya que constituyen una importante herramienta para facilitar su conservación [1]. Es una de las operaciones unitarias más comunes en la preservación de fuentes nutricionales y principios activos de estas especies, la cual implica simultáneamente una transferencia de calor y masa [2]. Por otra parte, las propiedades físico-químicas y la geometría del producto, son factores determinantes en la cinética de secado e influyen en la velocidad del proceso [3].

Tradicionalmente en el secado solar se combina la ventilación natural con la temperatura del aire. Esta técnica es ampliamente utilizada por los pequeños productores en la conservación de plantas medicinales y semillas. En dicha tecnología el material a secar se debe colocar en una capa fina, las cuales se remueven para evitar su sobrecalentamiento.

El principio del secado se basa en la extracción continua del agua desde el tejido hacia la atmósfera circundante, mediante la creación de un gradiente térmico entre el material biológico y el aire que lo rodea, manteniéndose éste a un mayor valor de temperatura.

La teoría de difusión es una de las vías para explicar este proceso, en ella se supone una velocidad de desplazamiento del agua hacia la interface, la cual está gobernada por las

mismas leyes que regulan el flujo de calor en un gas o de solutos en un disolvente [4]. Para el estudio de la eficiencia energética del proceso de dinámica de extracción de las moléculas de agua desde el tejido hacia la atmósfera exterior, se han desarrollado modelos basados en las mismas reglas de difusión que se aplican para los solutos en un medio [5] (leyes de Fick),

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = D \Delta \eta. \quad (1)$$

Donde η es la función que representa el número de moléculas de agua en el espacio por unidad de volumen (magnitud análoga a la concentración para el caso de los solutos) y D (m^2s^{-1}) es el coeficiente de difusión que está relacionado con la capacidad del sistema de dejar fluir el agua durante el proceso.

Al existir un gradiente térmico en la capa exterior del tejido, está pierde el agua que pasa inmediatamente a la atmósfera en forma de vapor, produciéndose un gradiente de humedad en el sistema biológico, que permite el flujo del agua desde las capas interiores hacia las exteriores, hasta que el material pierde casi la totalidad del agua presente.

El agua contenida en los tejidos vegetales no se encuentra distribuida uniformemente, por lo que en algunos alimentos se crean zonas microscópicas que no permiten la presencia del agua y se distribuyen de forma heterogénea. Es por ello

que el agua contenida en un producto no tiene las mismas condiciones en todos los puntos, lo cual ha llevado a los conceptos de agua libre y agua ligada [2].

Por ejemplo el agua que fluye por los tejidos conductores del xilema y el floema en tallos, raíces y hojas, o los poros que se encuentran en varios tipos de semillas, se puede decir que se encuentra menos ligada al sistema, y se conoce como agua libre [2]. Ésta, es sensible a cambios en los parámetros físicos como: temperatura, presión, fuerzas de capilaridad, entre otros; los cuales determinan su distribución por el tejido.

En cambio, dentro de las células, el citoplasma contiene agua y dentro de él existen vacuolas que también almacenan este líquido, los cuales pueden llegar a formar sitios de adsorción con enlaces que pueden tornarse relativamente fuertes [6]. Esta suele ser denominada como agua ligada.

Durante los procesos de secado el agua libre tiende a ser extraída de forma inmediata, mientras que el agua ligada exige más tiempo de secado o un tratamiento térmico de mayor intensidad [7].

Esta investigación tiene como objetivo desarrollar un modelo teórico adaptado a la dinámica de secado de hojas de tilo y un estudio experimental que corrobore el ajuste de las curvas de secado para diferentes valores de temperatura y humedad relativa del aire, lo cual aportará criterios para el secado solar de esta planta, en el sistema productivo.

II. PRESENTACIÓN DEL MODELO

La solución de la ecuación 1 dependerá de la forma matemática del Laplaciano $\Delta\eta$ y este a su vez depende de la geometría del sistema.

La Figura 1 muestra una sección rectangular fina del tejido foliar, donde se tiene en cuenta la geometría del corte realizado a las hojas, donde el ancho a está ubicado en el eje x , la longitud b en el eje y , y el espesor δ en el eje z .

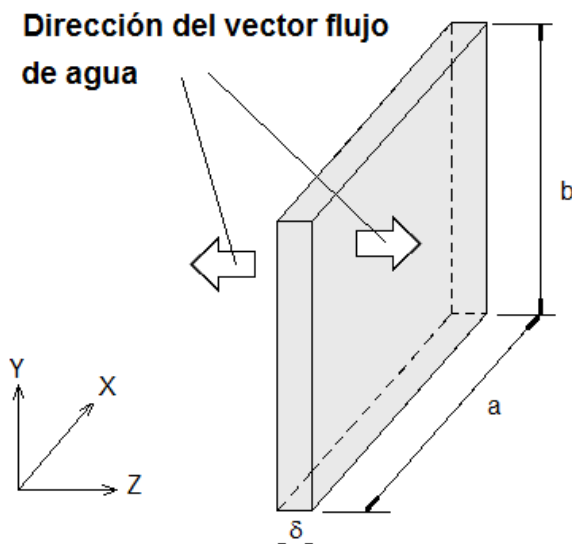


Figura 1. Esquema que representa una porción de tejido foliar plana y rectangular.

El diagrama que se muestra en la Figura 1 se ajusta a la morfología de la hoja, donde un segmento rectangular, posee un área superficial mucho mayor que el cuadrado de su espesor, es decir, $(ab \gg \delta^2)$. A partir de aquí, la ecuación 1 toma la forma:

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \eta}{\partial z^2}. \quad (2)$$

Al integrar la ecuación 2 por el método de separación de las variables, se deduce una dependencia exponencial de η respecto al tiempo.

$$\eta(t, z) = W(z)e^{-kt}. \quad (3)$$

Donde k es una magnitud denominada constante de secado, que de acuerdo con la solución de 2 está relacionada con el parámetro λ y con el coeficiente de difusión D :

$$D = \frac{k}{\lambda^2}. \quad (4)$$

La ecuación 3 es la expresión que usualmente se utiliza por diferentes autores para caracterizar la dinámica de secado [3, 8], de acuerdo al modelo de Henderson y Pabis (también conocido como modelo de Newton).

La ecuación 4 indicó que inicialmente existe un valor de máxima distribución de las moléculas de agua (η_M) hacia la capa central ($z = \delta/2$) y que η tiende a cero en los extremos $z = 0$ y $z = \delta$ (condiciones de frontera).

Para establecer la variable "z", se emplearon las condiciones de frontera como se muestra:

$$\eta(t, z) = n_M e^{-kt} \sin \left[\frac{\pi}{\delta} z \right]. \quad (5)$$

Por otra parte, el contenido de humedad M se define como la masa de agua por volumen V de tejido, dividida entre su masa seca m_s :

$$M(t) = \frac{m_A}{m_s} \int_V \eta(t, z) dV, \quad (6)$$

donde m_A es la masa de cada molécula de agua. Al combinar 5 y 6 se obtiene:

$$M(t) = M_0 e^{-kt}, \quad (7)$$

Donde M_0 es considerado como el contenido de humedad inicial:

$$M_0 = \frac{2m_A a b \delta n_M}{\pi m_s} \quad (8)$$

III. DESARROLLO EXPERIMENTAL

El secador solar utilizado es de construcción artesanal y se encuentra ubicado en el área del Lixímetro del INIFAT (Figura 2). La cámara de secado consta de paredes dispuestas en forma vertical, construidas con láminas de metal y alberga

en su interior un carro móvil, que admite hasta nueve bandejas de madera con fondo de malla metálica.

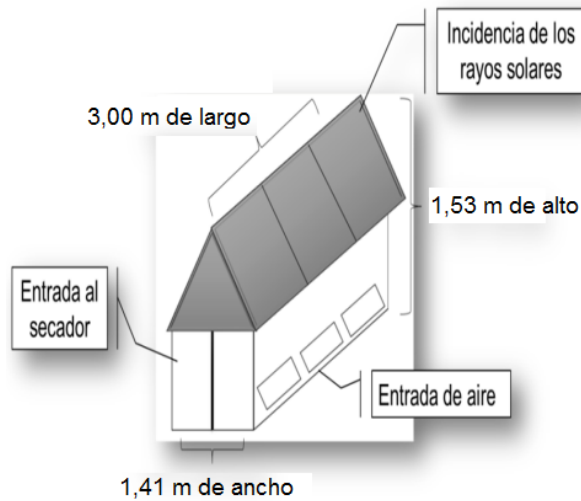


Figura 2. Secador solar.

Las variables termodinámicas del aire (temperatura y humedad relativa) dentro y fuera de la cámara durante el secado, fueron monitoreadas a través de un psicrómetro. En la cosecha se eliminaron las hojas marchitas y con presencia de daños físicos, luego se lavaron y desinfectaron con agua e hipoclorito de sodio al 2 %, antes de ser sometidas al proceso de secado [9].

Este proceso se llevó a cabo en diferentes meses del año. Los experimentos se agruparon en ocho variantes para garantizar diferentes condiciones de temperatura y humedad relativa del aire (Tabla 1).

Cada hoja fue cortada en forma rectangular y determinada su largo, ancho y espesor. En el contenido de humedad se empleó el método gravimétrico, a partir de sus valores de masa húmeda (m_H) y seca (m_S):

$$M = \frac{m_H - m_S}{m_S} \quad (9)$$

Tabla 1. Condiciones experimentales utilizadas durante el secado (claves A-H), con sus respectivos valores de temperatura, ubicadas en dos grupos según los valores de humedad relativa.

Clave	T(°C)	HR (%)
A	28.3±1.1	84.7±1.9
B	31.6±1.2	
C	36.3±1.0	
D	39.5±0.9	
E	25.2±1.3	89.4±1.2
F	30.8±1.0	
G	33.5±1.4	
H	35.0±1.7	

Todas las muestras fueron introducidas dentro del secador y se recopiló la información en diferentes momentos, para obtener los valores de M respecto al tiempo de secado. Estos datos fueron ajustados por medio de la ecuación 7, obteniéndose así las constantes de secado k para cada variante.

Posteriormente, con la dependencia de k con respecto a la temperatura (ecuación de Arrhenius), se calculó la energía de activación E_A , necesaria para extraer una molécula de agua, mediante la expresión:

$$\ln k = \ln k_0 - \frac{E_A}{RT} \quad (10)$$

Donde R es la constante universal de los gases ($8.31 \text{ Jmol}^{-1}\text{K}^{-1}$) y k_0 es una constante comúnmente denominada factor pre-exponencial o de frecuencia.

El espesor δ de la hoja fue determinado a partir de 50 muestras colectadas y evaluadas por medio de un micrómetro. Posteriormente se calculó el valor del coeficiente λ y la difusión D mediante la ecuación 10.

La determinación cualitativa de principios activos se realizó mediante la técnica de tamizaje fitoquímico y la metodología empleada fue la descrita en la literatura para el reconocimiento de diferentes compuestos [10].

IV. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La Figura 3 muestra las curvas de secado ajustadas mediante el modelo de Henderson y Pabis (ecuación 7).

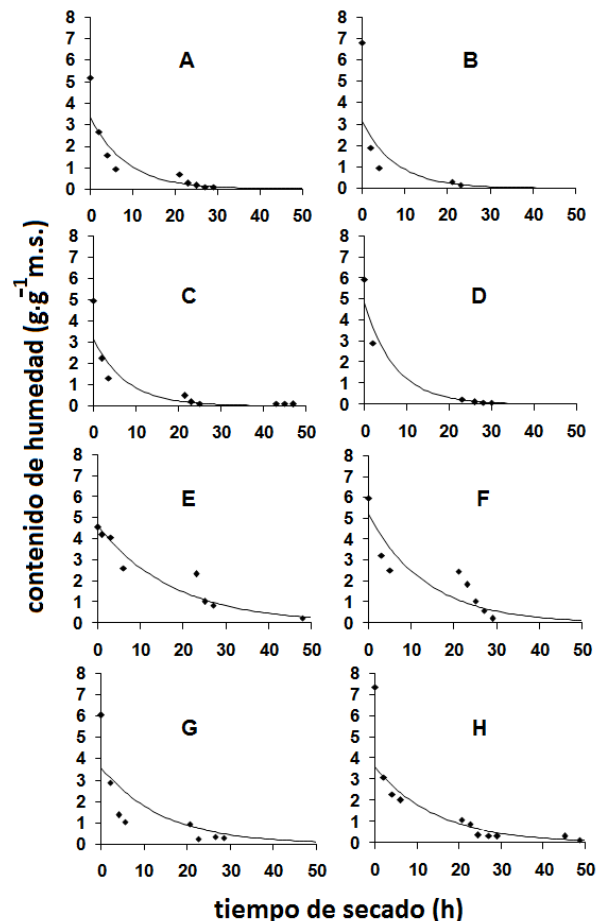


Figura 3. Curvas de secado obtenidas para las diferentes variantes experimentales ajustadas al modelo de Henderson y Pabis (Newton). Los puntos representan los valores experimentales y las líneas continuas describen el ajuste por medio de la ecuación 7.

Se corroboró que el contenido de humedad expresado en $g \cdot g^{-1}ms$, disminuye con el tiempo mediante un comportamiento exponencial, lo cual coincide con lo planteado por diversos autores en la deshidratación de las plantas medicinales [7, 11]. En el interior de la cámara de secado, la temperatura fluctuó entre 22-43 °C, intervalo que ha sido informado como favorable en el secado de plantas medicinales, y donde los valores no deben exceder los 45°C para conservar el principio activo de la planta [1].

Se constataron también variaciones importantes de la humedad relativa durante el transcurso del día, marcada por la ocurrencia de los fenómenos de adsorción y desorción en un mismo proceso de secado. Los valores máximos estuvieron por encima del 90% en horarios de la mañana y las mínimas alrededor de 60%, medidos entre las 12:00 y 2:00 de la tarde. A partir de este horario comienzan nuevamente los cambios en la tasa de secado, en correspondencia con el intercambio que se establece entre el material vegetal y el ambiente del aire de secado.

En cada una de las curvas ajustadas se muestra entre las 10 y 20 h el periodo nocturno. Se constató que a pesar de las condiciones que caracterizan ese horario (bajas temperaturas y alta humedad relativa) el porcentaje de humedad disminuyó, debido a la acumulación de calor dentro de la cámara de secado. Sin embargo, este comportamiento puede variar en dependencia de los cambios de temperatura y humedad relativa durante el día. Resultados similares se han obtenido durante el secado solar de la albahaca (*Ocimum basilicum* L.), el malojillo (*Cymbopogon citratus*) y el toronjil (*Melisa officinalis* L.) [12].

La Figura 3 muestra un mayor alejamiento del modelo durante el periodo nocturno, lo cual puede deberse a la adsorción de humedad por parte del material y/o a la baja transferencia de masa en ese tiempo.

El grado de deshidratación del material constituye un elemento a considerar durante el horario nocturno, ya que pudiera iniciarse la adsorción de moléculas de agua por parte del material, debido a que en ese momento presenta una menor presión de vapor con respecto a la presión de vapor del aire, lo cual tiene su fundamento en la isoterma de equilibrio propia de la especie. Por esta razón, se recomienda que una vez culminado el secado se empaque y almacene inmediatamente.

Estudios anteriores han mostrado que la ecuación de Midilli describe correctamente el secado de las hojas de mororó [13], en el intervalo de temperatura de 30 a 60°C, sin embargo, el modelo exponencial (al que refiere), fue empleado para las hojas de salvia [14], con temperaturas entre 40 a 90°C. Es por ello que se plantea que el ajuste matemático depende de las características químicas y botánicas de la especie vegetal en estudio, por lo que se debe realizar la cinética de manera individual para cada planta.

Los modelos matemáticos son representaciones de los procesos reales con distintos niveles de descripción que relacionan siempre el carácter del fenómeno y en el secado intervienen diversos factores como son las características de

la planta. Por ejemplo, el tilo al igual que la morera, tiene las hojas en forma aplanada y esta particularidad provoca que estas se adhirieran unas a otras y se limite el espacio para el paso del aire, Ésta pudo ser la causa por la cual se produjo la variabilidad en la velocidad del proceso [15], y por tanto, del cambio del modelo descriptivo, con respecto a otros materiales.

El ajuste matemático del secado de las semillas, es totalmente diferente, debido a que la migración de la humedad del material depende de la geometría del sistema, que es radial por la forma esférica que presentan estos materiales [3]. En el tilo debido a que el espesor de la hoja es muy pequeño comparado con el resto de las dimensiones ($\delta \ll a \ll b$), el flujo migratorio solo se considera en un solo eje.

En la Figura 3 no se observó el periodo de velocidad constante al ajustar los datos experimentales, lo cual indica que la difusión es el principal mecanismo físico que gobierna el movimiento de la humedad durante el secado de esta planta. Diversos autores plantean que las curvas que presentan este comportamiento, se caracterizan por presentar una velocidad de secado con período decreciente controlado por difusión [11]. En el secado solar es importante prestar atención a los valores de humedad del aire. Los resultados muestran que aunque el material esté sometido a un ambiente de alta temperatura, que favorezca la extracción de agua, un valor alto de humedad relativa del aire ejerce una mayor presión de vapor en el tejido, lo cual dificulta el proceso de secado. Los ajustes realizados, con valores de R² por encima de 0.69 en todos los casos, corroboran esta dependencia (Tabla ??).

La misma muestra los coeficientes de difusión obtenidos para los dos valores de humedad relativa del aire. Se observó que los resultados que corresponden a la humedad más alta (89.4%) representaron los menores coeficientes de difusión estadísticamente significativos. Ello indica que para un ambiente más húmedo, el flujo de agua hacia la atmósfera exterior se dificulta, retrasándose así el proceso de secado de la hoja.

Tabla 2. Valores de las constantes de secado obtenidos por medio del ajuste de la ecuación 7, con sus respectivos valores del coeficiente de bondad de ajuste y el de difusión calculado a través de la ecuación 8.

Clave	$k(10^{-6}s^{-1})$	$D(10^{-10}m^2s^{-1})$	R ²
A	32,89	0,721	0,906
B	35,81	0,784	0,863
C	33,30	0,730	0,841
D	39,05	0,836	0,942
E	16,03	0,351	0,910
F	21,56	0,472	0,696
G	23,44	0,514	0,806
H	26,10	0,572	0,804

Los valores obtenidos para hojas de tilo, se encontraron en el orden de $10^{-10} m^2s^{-1}$, resultado por encima de lo obtenido para tomillo y hojas de *Bauhinia forficata* [16, 17]. Estas diferencias se deben a que la difusividad efectiva depende de las características del aire de secado y de las demás propiedades físico-químicas del producto [18].

Además, en la Tabla 2 se muestra que la constante de secado (k) aumenta en función de la temperatura del aire.

Este coeficiente está relacionado con la difusión líquida que controla el proceso y varía de acuerdo con la temperatura y la cantidad de agua inicial del producto. Por lo que el proceso que presenta mayor valor de k , será el de mayor coeficiente de difusión [18].

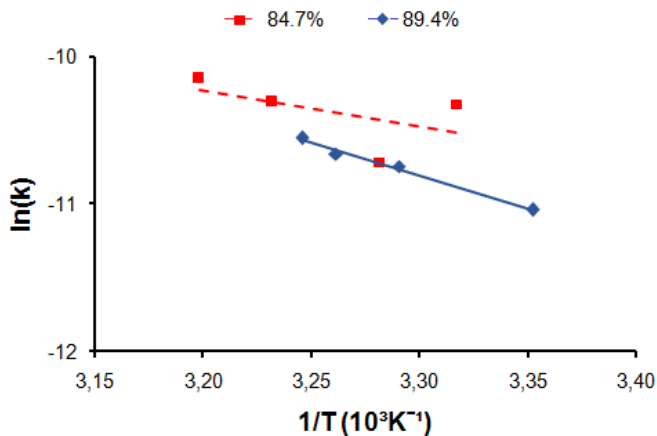


Figura 4. Ajuste de la ecuación de Arrhenius 10 para dos valores de humedad relativa del aire. $R_2 = 0.50$ y $R_2 = 0.99$, para las humedades 84.7% y 89.4%, respectivamente.

La difusión aumenta con el incremento de la temperatura del aire de secado, lo cual favorece la transferencia de masa, evidenciándose la reducción de las resistencias internas al flujo del agua [18].

La Figura 4 representa la ecuación 10, obtenida para las dos humedades relativas del aire que se utilizaron en el experimento, y a partir de ella se pudieron calcular dos valores de energía de activación E_A . De esta forma, se obtuvieron valores de E_A de 6.95 y 36.8 kJmol⁻¹, para humedades en el interior del secador de 84.7% y 89.4%, respectivamente. Estos valores se encuentran en el intervalo de 15 a 40 kJmol⁻¹ propuestos para diferentes materiales vegetales [19].

Aunque el gradiente térmico aplicado sobre el material, fue lo suficientemente alto como para extraer casi la totalidad del agua presente en las hojas en 40 horas, los valores del coeficiente de difusión, infieren que el material no fue destruido y que además conservó sus propiedades terapéuticas. En la práctica, durante el secado artesanal, los productores utilizan las diferentes épocas del año para poder obtener combinaciones de temperatura y humedad que resulten más factibles para tales propósitos.

Tabla 3. Valores de las constantes de secado obtenidos por medio del ajuste de la ecuación 7, con sus respectivos valores del coeficiente de bondad de ajuste y el de difusión calculado a través de la ecuación 8.

Clave	Alcaloides	Cumarinas	Azúcares	Quinonas	Taninos	Aminoácidos libres	Flavonoides
A	2	2	3	3	3	2	3
B	1	2	3	1	3	0	3
C	3	3	3	3	3	3	3
D	2	3	3	2	3	3	3
E	1	2	3	1	3	1	3
F	1	2	3	1	3	0	3
G	2	2	3	1	3	3	3
H	3	3	3	3	3	3	3

El empleo de este método de secado tiene sus desventajas. Una de ellas es el sobre calentamiento prolongado, que puede causar daños en el material. Además, se corre el riesgo del re-humedecimiento de la droga durante el período lluvioso, debido a la ocurrencia de precipitaciones, independientemente de que el secador esté correctamente cerrado. Sin embargo, en el período de poca lluvia (octubre-marzo), el secado tiende a dificultarse debido a las bajas temperaturas y las variaciones en la humedad relativa.

En general, las características morfológicas de esta especie, facilitan el secado, ya que se realiza relativamente rápido y sin pérdidas de la cumarina, metabolito secundario al que se le atribuyen las propiedades sedativas a esta planta [20] (Tabla 3).

En la Tabla 3 se muestran los resultados de los análisis de los extractos fluidos de las hojas secas, para cada una de las 8 variantes experimentales. Se apreció que para ambos ambientes con diferente humedad relativa del aire, una variabilidad en los compuestos asociados a las propiedades terapéuticas del material, después de aplicar las diferentes variantes de secado.

La mayoría de los extractos mostraron la misma composición química a excepción del B y el F donde no se identificaron aminoácidos libres.

Se evidenció la presencia de cumarina independientemente de las condiciones de secado, sin embargo la evaluación cualitativa de la intensidad en las diferentes reacciones colorimétricas del tamizaje, infirió variabilidad en la concentración de este metabolito, el cual pudo haber disminuido de acuerdo al momento de cosecha o como respuesta a los cambios en los parámetros termodinámicos del proceso.

Este resultado no es concluyente, ya que el tamizaje solo brinda una visión de la composición química de la planta, pero no determina las cantidades que presentan cada uno de estos compuestos en el extracto.

V. CONCLUSIONES

Las curvas ajustadas al modelo propuesto, validan la utilización de este tipo de secador para las hojas de tilo. Los cálculos realizados a través de la ecuación de Fick para las

moléculas de agua, describen la dinámica de extracción, en la cual se obtienen valores de coeficiente de difusión y energía de activación, inferiores a los reportados para otras especies. El tamizaje fitoquímico corrobora que con el gradiente térmico generado al interior de la cámara, es posible el secado solar de la planta, sin afectar cualitativamente sus propiedades terapéuticas.

REFERENCIAS

- [1] L. Acosta de la Luz y J. Tillán, En *Avances de la Agroecología en Cuba* **1**, 313 (2016).
- [2] M.C. Figueredo-Rondón y R.R. González-Gutiérrez, *Tecnología Química* **37**, 339 (2017).
- [3] A. Socorro, M. Vega y S. Calderón, *J. Chem., Biol. Phys. Sci. Section B* **5**, 520 (2015).
- [4] J.M. Coulson, J.F. Richardson y J.R. Backhurst, *Ingeniería Química. Operaciones básicas*. (Ed Reverte, Barcelona 1981), pp 950.
- [5] M. Golmohammadi, M. Assar, M. Rajabi-Hamaneh y S.J. Hashemi, *Food Bioprod. Process.* **94**, 275 (2015).
- [6] A. Socorro, M. Vega, y S. Calderón, *Int. Agrophys* **24**, 313 (2010).
- [7] M.I. González-Hurtado, L.D. Porras-Barrientos, A.C. Agudelo-Flores, O.A. Quintero-Cardona y C.F. Diosa-Quintero, *Vitae Rev. De la Facultad de Ciencias Farmacéuticas y Alimentarias*, **21**, 97 (2014).
- [8] B. Chinè-Polito, *Tecnología en Marcha*, **29**, 62 (2015).
- [9] H. Harrak, M. Lebrun, M.M.I. Alaoui, S. Sarter y A.Hamouda, *Botany (John KiogoraMworia, Rijeka, Croacia, 2012)* pp 85. (2012)
- [10] M.Miranda y A. Cuellar, *Manual de prácticas de laboratorio. Farmacognosia y productos naturales*, 62 (2000).
- [11] K.O. Falade y A. O. Solademi, *Int. J. Food Sci. Tech.* **45**, 278 (2010).
- [12] I.J. Chinappi, C. Alonso, T. Uzcategui y C. Mary, *Revista Academia* **11**, 235 (2012).
- [13] J.J. Alves, F. Cordeiro de Sousa, A.P. Trindade, J. Nobre y J. Palmeira, *Revista Cubana de Plantas Medicinales* **20**, 397 (2015).
- [14] M.A. Radunz, C.A. Zakrzewski, A.S. Amaral y L. Grassmann, *Rev. Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental* **14**, 979 (2010).
- [15] M.L. Pineda, A. Chacón y G. Cordero, *Agronomía Mesoamericana* **20**, 275 (2009).
- [16] R.M. P. da Rocha, E. C. Melo, J.B. Corbín, P.A. Berbert, S.M.L. Donzeles y J.A. Tabar, *Rev. Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental* **16**, 675 (2012).
- [17] F.P. da Silva, V.Siqueira, E.A.Martins, F.M. Miranda y R.M. Melo, *Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental*, **21**, 61 (2017).
- [18] A. L. Goneli, M. C. Vieira, C. B. Vilhasanti, y A. A. Gonçalves, *Pesquisa Agropecuária Tropical* **44**, 56 (2014).
- [19] G. Martínez, A. Flores, J. Mercado y M. López, *Acta Universitaria* **20**, 70 (2013).
- [20] J. Rodríguez y C.Rodríguez, *Revista Cubana de Farmacología*, **48**, 3 (2014).

This work is licensed under the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0, <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0>) license.



THROUGHFLOW AND MAGNETIC FIELD EFFECTS ON THE ONSET OF CONVECTION IN A HELE-SHAW CELL

EFFECTOS DEL FLUJO Y EL CAMPO MAGNÉTICO SOBRE EL COMIENZO DE LA CONVECCIÓN EN UNA CELDA DE HELE-SHAW

D. YADAV

Department of Mathematical & Physical Sciences, University of Nizwa, P.O.B.-616, Oman; dhananjayadav@gmail.com[†]

[†] corresponding author

Recibido 28/9/2018; Aceptado 30/10/2018

An analytical investigation of the combined effects of throughflow and magnetic field on the convective instability in an electrically conducting fluid layer, bounded in a Hele-Shaw cell is presented within the context of linear stability theory. The outcome of the important parameters on the stability of the system is examined analytically as well as graphically. It is observed that the throughflow and magnetic field have both stabilizing effects, while the Hele-Shaw number has a destabilizing effect on the behavior of the system. It is also found that the oscillatory mode of convection is possible only when the magnetic Prandtl number takes the values less than unity.

Se presenta una investigación analítica de los efectos combinados del flujo y el campo magnético en la inestabilidad convectiva de una capa fluida conductora de electricidad, confinada en una celda de Hele-Shaw, en el contexto de la teoría lineal de la estabilidad. Se examinan los resultados para los parámetros relevantes tanto analítica como gráficamente. Se observa que tanto el flujo como el campo magnético, tienen efectos estabilizantes, mientras que el número de Hele-Shaw tiene un efecto desestabilizante. También se encuentra que el modo de convección oscilatorio es posible sólo cuando el número magnético de Prandtl es menor que la unidad.

PACS: Hydromagnetic plasma instability (Inestabilidad de plasma hidromagnético), 52.35.Py; Convection (Convección), 47.55.P-; Flow instabilities (Inestabilidades de flujo), 47.20.Bp; Applied fluid mechanics (Mecánica de fluidos aplicada), 47.85.Dh; Fluids (Fluidos), 47.35.-l

I. INTRODUCTION

This paper deals with the joint effect of magnetic field and throughflow on the convective instability of an electrically conducting fluid layer confined vertically by two thermally insulated planes and horizontally by two perfect heat conducting planes. This configuration is called the Hele-Shaw cell. A range of applications of fluid mechanics goes to the Hele-Shaw flows. Nowadays, this flow is applied in numerous fields of physics and engineering, in particular, material processing and crystal growth owing to manufacturing procedures [1–3]. Also, during the last years, convection in a porous medium has gained significant interest because of its importance in geothermal, petroleum production, oil reservoir, building of thermal insulations and nuclear reactor [4]. The problem in a porous medium can be easily solved by taking an appropriate permeability of the Hele-Shaw cell. Hele-Shaw [5] was the first who pointed out the similarity between the two-dimensional flow in a porous medium and Hele-Shaw cell by taking an equivalent permeability for the Hele-Shaw cell, where is the width of the cell. He showed that the Hele-Shaw cell can be a controlling device for quantitative study of two-dimensional flow in porous media by suitably recognizing the Hele-Shaw permeability. The similarity among flow in a porous medium and flow in a Hele-Shaw cell has commonly been applied to study convection in the former [6–8].

The convective instability of electrically conducting fluid in the existence of a magnetic field has drawn great attention

as a consequence of its many real-world applications for instance in electrical machineries, chemical apparatus, plasmas, MHD accelerators and power generation systems. The study of magnetic field on the onset of convection yields a range of activities when the ratio of the magnetic to thermal diffusivity is small; the governing system then allows both stationary and oscillatory mode of convections. The strength of magneto convection is indicated by the Chandrasekhar number, which is the relation between the Lorentz force and the viscosity. If the Lorentz force was smaller than the viscous force, then the convective motions twist and stretch the magnetic field. If the Lorentz force was larger than the viscous force, then the magnetic field sets the plasma flows along the field direction and constrains the convection. The large numbers of investigations related to magneto convection are recognized by Chandrasekhar [9] and Nield and Bejan [4]. Thompson [10] and Chandrasekhar [9] were the first to examine the effect of magnetic fields on the convective instability. Rudraiah and Shivakumara [11] studied convection with an imposed magnetic field. They observed that the magnetic field, under some situations, makes the system unstable. The interplay between magnetic fields and convection by considering the effect of a solid rotor on a non-uniform magnetic field was investigated by Weiss [12]. Abd-el-Malek and Helal [13] studied the problem of an unsteady convective laminar flow under the effect of a magnetic field. They found that the velocity boundary-layer thickness becomes smaller for the increase in the magnetic influence number. Very recently, the effect of magnetic field

on the convective instability in nanofluids was considered by Yadav et al. [14–18], Chand and Rana [19,20], Sheikholeslami et al. [21–23], Al-Zamily [24], Gupta et al. [25] and Hamada et al. [26].

The throughflow effect on the convective instability in an electrically conducting fluid layer with magnetic field is an important concept because of its applications in engineering, geophysics and magneto-hydrodynamics. In situ processing of electronic components, chemical equipment, cooling of nuclear reactors, energy assets such as coal, geothermal energy, oil shale and many real-world problems frequently occupy the throughflow in a Hele-Shaw cell. The significance of buoyancy-driven convective instability in such circumstances may become important when specific processing is needed. Besides, the throughflow effect in such situations offers the opportunity of controlling the convective instability by regulating the throughflow in accumulation to the gravity. Throughflow changes the basic temperature profile from linear to nonlinear with layer height, which influences the stability of the system considerably. The effect of throughflow on the onset of convection was studied by Jones and Persichetti [27]. Its extension to porous medium was made by Wooding [28], Sutton [29] and Nield [30]. They observed that the effect of throughflow is not always stabilizing and depends on the character of the boundaries. Khalili and Shivakumara [31] examined the effect of throughflow on the onset of convection in a porous medium with internal heat generation. They observed that throughflow destabilizes the system in the presence of an internal heat source, even if the boundaries are of the same type. Later on, many investigators studied the effect of throughflow on convective instability for different types of fluids [32–36].

However, no study has been found in the literature which considers the effect of throughflow on magneto convection confined within a Hele-Shaw cell. Therefore, here we examine the combined effect of throughflow and magnetic field on the convective instability in an electrically conducting fluid layer, bounded within a Hele-Shaw cell. By linear stability theory, the critical conditions for stationary and oscillatory convections are derived analytically, and discussed graphically.

II. MATHEMATICAL MODEL

In this work, an infinitely extended horizontal incompressible electrically conducting fluid layer of height d is considered. The fluid layer is confined between two parallel boundaries at $z^* = 0$ and $z^* = d$ which are preserved at uniform but different temperatures T_l^* and T_u^* ($T_l^* > T_u^*$), respectively. The fluid shall be infinite in the x -direction, but restricted in the y -direction by sidewalls at $y^* = 0$ and $y^* = b$. For a suitably small thickness, $b \ll d$, the flow can be estimated as a 2-dimensional Stokes flow in the $x-z$ -plane, usually called a Hele-Shaw flow. A constant magnetic field $\vec{H}^* = (0, 0, H_0^*)$ is applied. The physical configuration of the system is shown in figure 1. Asterisks are used to differentiate the dimensional variables from the

non-dimensional variables (without asterisks).

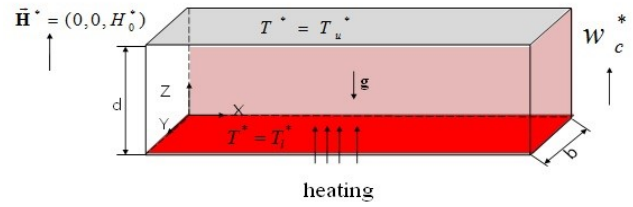


Figure 1. The physical configuration of the system.

By considering the Hele-Shaw approximation and using the Boussinesq approximation, the governing equations under this model are:

$$\nabla^* \vec{v}^* = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\mu}{K} \vec{v}^* = -\nabla^* p^* + \rho_0 [1 - \beta(T^* - T_u^*)] \vec{g} + \mu_e (\vec{H}^* \cdot \nabla^*) \vec{H}^*, \quad (2)$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial t^*} + (\vec{v}^* \cdot \nabla^*) \right] T^* = \alpha \nabla^{*2} T^*, \quad (3)$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial t^*} + (\vec{v}^* \cdot \nabla^*) \right] \vec{H}^* = \nu_m \nabla^{*2} \vec{H}^* + (\vec{H}^* \cdot \nabla^*) \vec{v}^*, \quad (4)$$

$$\nabla^* \vec{H}^* = 0. \quad (5)$$

Here, \vec{v}^* is the velocity of the fluid, t^* is the time, ρ_0 is the fluid density at the reference temperature T_u^* , p^* is the pressure, \vec{H}^* is the magnetic field, β is the thermal expansion coefficient, α is the thermal diffusivity, $K = b^2/12$ is the permeability of the fluid flow in the Hele Shaw cell, μ , ν_m , μ_e and k are the viscosity, magnetic viscosity, magnetic permeability and thermal conductivity of the fluid, respectively. As stated before, eqs. 1,2,3,4,5 are written under Boussinesq approximation, which neglects density differences except where they appear in terms multiplied by gravity's acceleration.

We assume that there is an upward throughflow with constant mean value w_u^* . Thus the boundary situations are:

$$w^* = w_c^*, \quad T^* = T_l^*, \quad \text{at } z^* = 0, \quad (6a)$$

$$w^* = w_c^*, \quad T^* = T_u^*, \quad \text{at } z^* = d. \quad (6b)$$

We define the following non dimensional variables:

$$x = \frac{x^*}{d}, \quad t = \frac{t^*}{d^2} \alpha, \quad p = \frac{p^* d^2}{\mu \alpha}, \quad T = \frac{T^* - T_u^*}{T_l^* - T_u^*}, \quad \vec{v} = \frac{d}{\alpha} \vec{v}^*, \quad \vec{H} = \frac{\vec{H}^*}{H_0^*}. \quad (7)$$

The governing equations then become:

$$\nabla \vec{v} = 0, \quad (8)$$

After substituting the eq. 18 into eqs. 8-10, and linearizing the equations, we get:

$$\frac{\vec{v}}{H_s} = -\nabla p + R_a T \hat{e}_z + Q P_m (\vec{H} \cdot \nabla) \vec{H}, \quad (9) \quad \nabla \vec{v}' = 0, \quad (19)$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \right] T = \nabla^2 T, \quad (10) \quad \frac{\vec{v}'}{H_s} = -\nabla p' + R_a T' \hat{e}_z + Q P_m \frac{\partial \vec{H}'}{\partial z}, \quad (20)$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \right] \vec{H} = (\vec{H} \cdot \nabla) \vec{v} + P_m \nabla^2 \vec{H}, \quad (11) \quad \frac{\partial T'}{\partial t} + \vec{v}' \cdot \nabla T_b + \vec{v}_b \cdot \nabla T' = \nabla^2 T', \quad (21)$$

$$\nabla \vec{H} = 0. \quad (12) \quad \frac{\partial \vec{H}'}{\partial t} + \vec{v}' \cdot \vec{H}_b' + \vec{v}_b' \cdot \vec{H}' = \vec{H}' \cdot \nabla \vec{v}_b + \vec{H}_b \cdot \nabla \vec{v}' + P_m \nabla^2 \vec{H}' \quad (22)$$

$$\text{In the non-dimensional form, the boundary conditions become:} \quad \nabla \vec{H}' = 0. \quad (23)$$

$$w = \lambda, \quad T = 1, \quad \text{at } z = 0, \quad (13a)$$

$$w = \lambda, \quad T = 0^*, \quad \text{at } z = 0. \quad (13b)$$

The non-dimensional parameters in eqs. 8-12 are $R_a = g d^3 \beta \Delta T / \alpha \nu$ (Rayleigh number), $H_s = K / d^2$ (Hele-Shaw number), $P_m = \nu_m / \alpha$ (magnetic Prandtl number), $Q = \mu_e H_0^2 d^2 / \rho_0 \nu \nu_m$ (Chandrasekhar number), $\nu = \mu / \rho_0$ (kinematic viscosity), $\nu_m = \mu_e / \rho_0$ (magnetic viscosity) and $\lambda = d w_c^* / \alpha$ (Péclet number).

II.1. Basic State

The basic state of the fluid is considered time-independent, and is given by

$$\vec{v}_b = \lambda \hat{e}_z, \quad T = T_b, \quad p = p_b, \quad \vec{H}_b = \hat{e}_z. \quad (14)$$

Then eq. 10 gives:

$$\frac{d^2 T_b}{dz^2} - \lambda \frac{dT_b}{dz} = 0. \quad (15)$$

The boundary conditions for $T_b(z)$ are:

$$T_b = 1 \quad \text{at } z = 0, \quad T_b = 0 \quad \text{at } z = 1. \quad (16)$$

With the application of the boundary conditions 16, the solution of eq. 15 is

$$T_b(z) = \frac{e^\lambda - e^{\lambda z}}{e^\lambda - 1} \quad (17)$$

II.2. Perturbation theory

We now apply small perturbations on this basic state as:

$$\vec{v} = \vec{v}_b + \vec{v}', \quad T = T_b + T', \quad p = p_b + p', \quad \vec{H} = \hat{e}_z + \vec{H}' \quad (18)$$

where the primed quantities are functions of x and t .

Operating on eq. 21 with $\hat{e}_z \cdot \nabla$ and using the eqs. (19) and (23), we obtain the -component of the momentum equation as:

$$\frac{\nabla^2 w'}{H_s} - R_a \nabla_p^2 T' - Q P_m \nabla^2 \left[\frac{\partial H'_z}{\partial z} \right] = 0. \quad (24)$$

The z-component of the eq. 22 is

$$\frac{\partial H'_z}{\partial t} + \lambda \frac{\partial H'_z}{\partial z} = \frac{\partial w'}{\partial z} + P_m \nabla^2 H'_z, \quad (25)$$

eliminating from eqs. 24 and 25, we get:

$$\left(P_m \nabla^2 - \frac{\partial}{\partial t} - \lambda \frac{\partial}{\partial z} \right) \left[\frac{\nabla^2 w'}{H_s} - R_a \nabla_p^2 T' \right] + Q P_m \nabla \left[\frac{\partial w'}{\partial z} \right] = 0, \quad (26)$$

taking the perturbation quantities in the form:

$$(w', T') = [W(z), \Theta(z)] \exp[ik_x x + ik_y y + st], \quad (27)$$

where k_x and k_y are the wave numbers in the x and y directions, respectively and s is the growth rate of volatility. The growth rate s is commonly a complex number such that $s = s_r + is_i$. The case $s_r < 0$ means all time stability, while the system is unstable when $s_r > 0$. For neutral stability, the real part of s is zero. Hence, we consider $s = is_i$, where s_i is real and is a dimensionless frequency.

After inserting eq. 27 into eqs. 26 and 21, we have:

$$[P_m(D^2 - a^2) - is_i - \lambda D] \left[(D^2 - a^2) \frac{W}{H_s} + a^2 R_a \Theta \right] + Q P_m (D^2 - a^2) D^2 W = 0, \quad (28)$$

$$(D^2 - a^2 - \lambda D - is_i) \Theta - f W = 0, \quad (29)$$

where $d/dz \equiv D$, $f(z) = \lambda e^{\lambda z} / (1 - e^\lambda)$ and $a = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ is the resulting dimensionless wave number.

In the perturbation dimensionless form, the boundary conditions become:

$$W = 0, \quad \Theta = 0, \quad \text{at } z = 0, 1 \quad (30)$$

In order to solve the system of equations 28-30, the Galerkin weighted residuals method is applied. Accordingly, the support functions for and are assumed as:

$$W = \sum_{p=1}^N A_p W_p, \quad \Theta = \sum_{p=1}^N B_p \Theta_p, \quad (31)$$

where $W_p = \Theta_p = \sin p\pi z$ (fulfilling the boundary conditions), and A_p and B_p are unknown coefficients, and $p = 1, 2, 3, \dots, N$. On putting the above expression for W and Θ into eqs. 28-29, we get a system of $2N$ linear algebraic equations in the $2N$ unknowns A_p and B_p where $p = 1, 2, 3, \dots, N$. For the occurrence of non-trivial solutions, the determinant of coefficients matrix must be zero, which provides the characteristic equation for the system with Rayleigh number R_a as the eigenvalue.

III. RESULTS AND DISCUSSION

To get analytical results, we choose so the Darcy-Rayleigh number R_a is given by

$$R_a = \Delta_1 + i s_1 \Delta_2, \quad (32)$$

where

$$\Delta_1 = \frac{J(\lambda^2 + 4\pi^2) [J(s_i^2 + J^2 P_m^2) + H_s \pi^2 P_m (s_i^2 + J^2 P_m) Q]}{4a^2 H_s \pi^2 (s_i^2 + J^2 P_m^2)} \quad (33)$$

$$\Delta_2 = \frac{J(\lambda^2 + 4\pi^2) [s_i^2 + J P_m (J P_m + H_s \pi^2 (P_m - 1) Q)]}{4a^2 H_s \pi^2 (s_i^2 + J^2 P_m^2)} \quad (34)$$

Here, $J = (a^2 + p^2)$.

Since R_a is a physical quantity, it must be real. Thus, it follows from eq. 33 that either $s_i = 0$ (stationary convection) or $\Delta_2 = 0$ ($s_i \neq 0$ non-oscillatory convection).

III.1. Stationary mode of convection

Stationary convection occurs when $s_i = 0$. In this case, from eq. 33, the stationary Rayleigh number R_a^S can be obtained as

$$R_a^S = \frac{(a^2 + \pi^2)(\lambda^2 + 4\pi^2) [(a^2 + \pi^2) + H_s \pi^2 Q]}{4a^2 H_s \pi^2} \quad (35)$$

From the eq. 35, it is clear that the critical Rayleigh number increases with an increase in Q and λ , while decreases with H_s . Thus, the magnetic field and the throughflow have a stabilizing effect, while the Hele Shaw number has a destabilizing effect on the system.

The critical wave number a_c can be obtained as

$$a_c = \pi(1 + H_s Q)^{1/4}. \quad (36)$$

For the case of porous medium ($H_s = 1$), eqs. 35 and 36 become:

$$R_a^S = \frac{(a^2 + \pi^2)(\lambda^2 + 4\pi^2) [(a^2 + \pi^2) + \pi^2 Q]}{4a^2 \pi^2}, \quad (37)$$

$$a_c = \pi(1 + Q)^{1/4}. \quad (38)$$

If there is no magnetic field ($Q = 0$), eqs. 37 and 38 become:

$$R_a^S = \frac{(a^2 + \pi^2)^2}{a^2} \left[1 + \frac{\lambda^2}{4\pi^2} \right], \quad (39)$$

$$a_c = \pi. \quad (40)$$

This result is identical to that found by Nield and Kuznetsov [37].

From eqs. 39 and 40, when the throughflow is equal to one, i.e. $\lambda = 1$, the critical Rayleigh number is 40.4784. Recently, Barletta et al. [38] obtained a more exact value by using a different methodology, getting 40.8751. Hence the approximation formula used in this paper gives an accuracy of 1%. This shows that the approximation used in this paper is satisfactory for the case when throughflow is equal to one.

In the absence of throughflow, i.e. $\lambda = 0$ eq. 37 gives

$$R_a^S = \frac{(a^2 + \pi^2) [(a^2 + \pi^2) + \pi^2 Q]}{a^2}. \quad (41)$$

Eq. 41 coincides with that of Kiran et al. [39].

III.2. Oscillatory mode of convection

For oscillatory convection $\Delta_2 = 0$ and $s_i \neq 0$. Using these in eq. 33, the expressions for oscillatory Rayleigh number R_a^{Osc} and the frequency of oscillations s_i can be written as:

$$R_a^{Osc} = \frac{J(\lambda^2 + 4\pi^2) [J(s_i^2 + J^2 P_m^2) + H_s \pi^2 P_m (s_i^2 + J^2 P_m) Q]}{4a^2 H_s \pi^2 (s_i^2 + J^2 P_m^2)}. \quad (42)$$

$$s_i = -J P_m [J P_m + H_s \pi^2 (P_m - 1) Q] \quad (43)$$

Eq. 43 shows that the necessary condition for the occurrence of oscillatory mode of convection is:

$$\frac{J P_m}{H_s \pi^2 (1 - P_m)} < Q \quad (44)$$

In order to build Q positive, the magnetic Prandtl number P_m must be less than unity. From eq. 43, it is also found that the oscillatory mode of convection is not likely in the absence of magnetic field.

The graphical representation of the stability of the system in (R_a, a) plane is made in Figs. 2-5 for various parameter values. The values used in the figures are taken from various sources [4, 9, 40-42]. The linear stability theory gives the

condition of stability in terms of the critical Rayleigh number, below which the system is stable, and unstable above.

decrease in the Hele-Shaw number H_s . Hence, the Hele-Shaw number has a destabilizing effect on the behavior of the system. This is because on increasing the value of Hele-Shaw number the permeability of the Hele-Shaw cell increases and consequently the width of Hele-Shaw cell increases, which in turn makes the fluid flow faster.

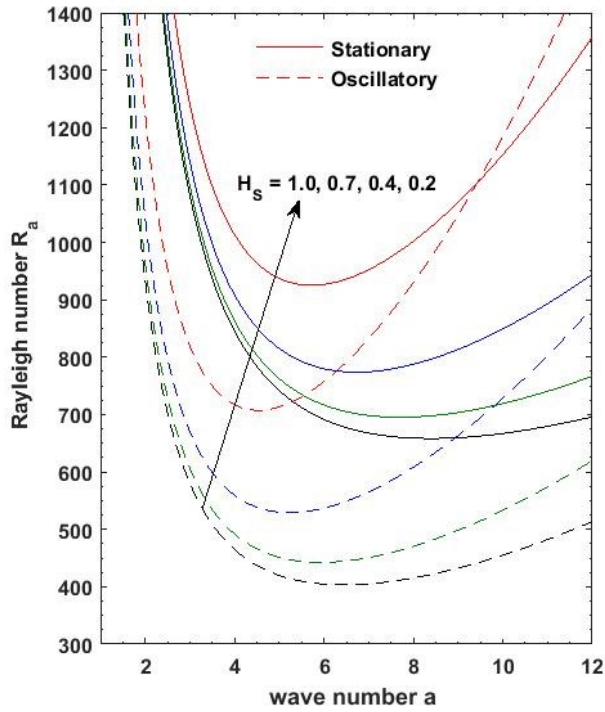


Figure 2. The effect of the Hele-Shaw number H_s on the stationary and oscillatory convection curves at $\lambda = 0.5$, $Q = 50$ and $P_m = 0.5$.

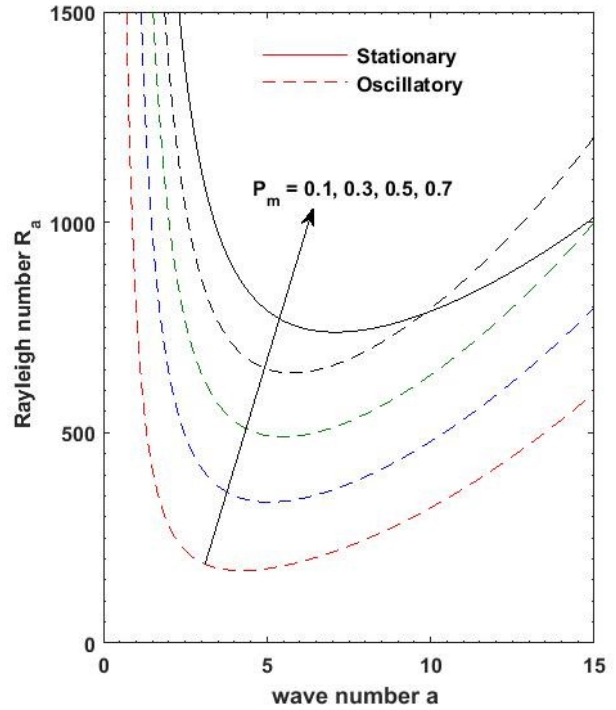


Figure 4. The effect of the through flow λ on the stationary and oscillatory convection curves at $Q = 50$, $H_s = 0.5$ and $P_m = 0.5$.

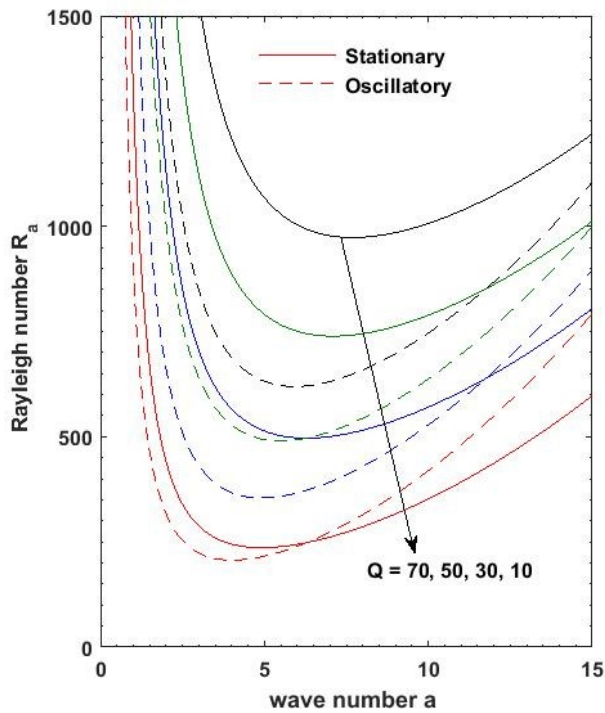


Figure 3. The effect of the magnetic field Q on the stationary and oscillatory convection curves at $\lambda = 0.5$, $H_s = 0.5$ and $P_m = 0.5$.

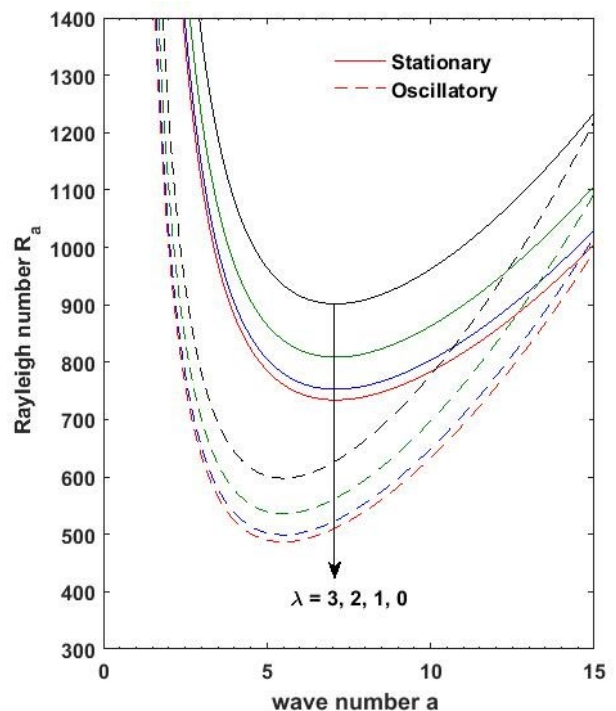


Figure 5. The effect of the magnetic Prandtl number P_m on the stationary and oscillatory convection curves at $Q = 50$, $H_s = 0.5$ and $\lambda = 0.5$.

Figure 2 represents the effect of the Hele-Shaw number H_s on the stability of the system. From the figure it is observed that the critical Rayleigh number increases with a

The effect of the magnetic field parameter Q on the onset of stationary and oscillatory convection curves are displayed in Figure 3. This figure shows that a decrease in the value of Q decreases the critical stationary and oscillatory Rayleigh numbers. Hence the magnetic field parameter Q delays the onset of convection. This is because the increase of Q increases the Lorentz force, and the Lorentz force gives more resistance to transport. Hence, the magnetic field has a stabilizing effect on the system.

The effect of the throughflow parameter λ on the stationary and oscillatory mode of convections is shown in Figure 4. The minima on each plot give the critical Rayleigh number for the exchange of stabilities. This critical Rayleigh number decreases with decreasing value of the throughflow λ and hence their effect is to delay the onset of convection.

To measure the effect of the magnetic Prandtl number P_m on the stability of the system, the deviation of Rayleigh number for stationary and oscillatory mode of convection is plotted in Figure 5 as a function of wave number a for different values of the magnetic Prandtl number P_m . From this figure it is observed that the magnetic Prandtl number P_m has no effect on the stationary convection, while for oscillatory convection it has a stabilizing effect on the system.

IV. CONCLUSIONS

In this paper, the combined effect of throughflow and magnetic field on the instability of a fluid confined within a Hele-Shaw cell heated from below was investigated using linear stability theory. The behaviour of the magnetic field, the throughflow and the Hele-Shaw number on the onset of convection was analyzed analytically and discussed graphically. The results show that the increase in magnetic field and strength of throughflow tends to stabilize the system. An increase in the Hele-Shaw number was found to have a destabilizing effect on the system. It was also observed that the oscillatory mode of convection is possible only when the magnetic Prandtl number is smaller than unity.

REFERENCES

- [1] H. Lamb, *Hydrodynamics*, (Cambridge, Cambridge University Press, 1993).
- [2] G. K. Batchelor, *An Introduction to Fluid Dynamics*, (Cambridge Mathematical Library, 1967).
- [3] L. M. Milne-Thomson, *Theoretical Hydrodynamics*, (Dover Publications, Inc., 1996).
- [4] D. A. Nield, A. Bejan, *Convection in Porous Media*, (Springer, New York, 2013).
- [5] H. S. J. Hele-Shaw, *Trans. Inst. Naval Archit.* **40**, 21 (1898).
- [6] J. W. Elder, *J. Fluid Mech.* **72**, 29 (1967).

- [7] B. K. Hartline and C. R. B. Lister, *J. Fluid Mech.* **79**, 379 (1977).
- [8] B. S. Bhadauria, P. K. Bhatia and L. Debnath, *Int. J. Non-Linear Mech.* **40**, 475 (2005).
- [9] S. Chandrasekhar, *Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability*, (Clarendon Press, 1961).
- [10] W. Thomson, *Phil. Mag.* **42**, 1417 (1951).
- [11] N. Rudraiah and I. S. Shivakumara, *Int. J. Heat and Mass Transfer* **27**, 1825 (1984).
- [12] N. O. Weiss, *J. Geophys. Res.* **86**, 11689 (1981).
- [13] M. B. Abd-el-Malek and M. M. Helal, *J. Comput. Appl. Math.* **218**, 202 (2008).
- [14] D. Yadav, R. Bhargava and G. S. Agrawal, *J. Eng. Math.* **80**, 147 (2013).
- [15] D. Yadav, R. Bhargava, G. S. Agrawal, G. S. Hwang, J. Lee and M. C. Kim, *Asia-Pacific J. Chem. Eng.* **9**, 663 (2014).
- [16] D. Yadav, C. Kim, J. Lee and H. H. Cho, *Computers & Fluids* **121**, 26 (2015).
- [17] D. Yadav, R. A. Mohamed, H. H. Cho and J. Lee, *J. Appl. Fluid Mech.* **9**, 2379 (2016).
- [18] D. Yadav, J. Wang, R. Bhargava, J. Lee and H. H. Cho, *Applied Thermal Eng.* **103**, 1441 (2016).
- [19] R. Chand and G. C. Rana, *Acta Mechanica et Automatica* **9**, 63 (2015).
- [20] R. Chand and G. C. Rana, *J. Nanofluids* **4**, 196 (2015).
- [21] M. Sheikholeslami, H. Hatami and G. Domairry, *J. Taiwan Inst. Chem. Eng.* **46**, 43 (2015).
- [22] M. Sheikholeslami, M. Gorji-Bandpy, D. D. Ganji, P. Rana and S. Soleimani, *Computers & Fluids* **94**, 147 (2014).
- [23] M. Sheikholeslami, F. B. Sheykhholeslami, S. Khoshhal, H. Mola-Abasia, D. D. Ganji and H. B. Rokni, *Neural Computing and Appl.* **25**, 171 (2014).
- [24] A. M. J. Al-Zamily, *Computers & Fluids* **103**, 71 (2014).
- [25] U. Gupta, J. Ahuja and R. K. Wanchoo, *Int. J. Heat Mass Transf.* **64**, 1163 (2013).
- [26] M. A. A. Hamada, I. Pop and A. I. M. Ismail, *Nonlinear Analysis: Real World Applications* **12**, 1338 (2011).
- [27] M. C. Jones and J. M. Persichetti, *AIChE J.* **32**, 1555 (1986).
- [28] R. A. Wooding, *J. Fluid Mech.* **9**, 183 (1990).
- [29] F. M. Sutton, *Phys. Fluids* **13**, 1931 (1970).
- [30] D. A. Nield, *AIChE J.* **33**, 1222 (1987).
- [31] A. Khalili and I. S. Shivakumara, *Phys. Fluids* **10**, 315 (1998).
- [32] I. S. Shivakumara and S. S. Kumar, *J. Geophys. Eng.* **4**, 104 (2007).
- [33] D. A. Nield and A. V. Kuznetsov, *Transp. Porous Med.* **87**, 765 (2011).
- [34] D. Yadav, J. Lee and H. H. Cho, *J. Braz. Soc. Mech. Sci. Eng.* **38**, 2299 (2016).
- [35] D. Yadav, *J. Appl. Fluid Mech.* **11**, 679 (2018)
- [36] Y. N. Murty, *Int. J. Numerical Methods for Heat & Fluid Flow* **9**, 677 (1999).
- [37] D. A. Nield and A. V. Kuznetsov, *Transp. Porous Med.* **111**, 731 (2016).
- [38] A. Barletta, M. Celli, A. V. Kuznetsov and D. A. Nield, *J. Heat Transfer* **138**, 032601 (2015).

- [39] P. Kiran, B. S., Bhadauria and Y. Narasimhulu, Alexandria Eng. J. **57**, 445 (2018). [41] D. Yadav, J. Wang and J. Lee, J. Porous Media **20**, 691 (2017).
- [40] D. Yadav, R. A. Mohamed, J. Lee and H. H. Cho, Ain Shams Eng. J. **8**, 613 (2017) [42] D. Yadav and M. C. Kim, J. Porous Media **17**, 1061 (2014).

This work is licensed under the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0, <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0>) license.



EFECTO DEL CAMPO MAGNÉTICO SOBRE EL ESPECTRO DE EMISIÓN PARA UN SISTEMA MICROCAVIDAD-PUNTO CUÁNTICO

MAGNETIC FIELD EFFECTS FOR THE EMISSION SPECTRA IN A MICROCAVITY-QUANTUM DOT SYSTEM

L.E. CANO^{a,b†}, P.S.S. GUIMARÃES^b, A. PORTACIO^a

a) Facultad de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad de los Llanos, sede Barcelona, km.12 Vía Puerto López, Villavicencio, Meta, Colombia

b) Departamento de Física, Instituto de Ciências Exatas, ICEx, Universidade Federal de Minas Gerais, Av. Antônio Carlos, 6627, Belo Horizonte Minas Gerais, Brasil; lecanof@gmail.com[†]

† autor para la correspondencia

Recibido 12/11/2018; Aceptado 5/12/2018

Se modela numéricamente el comportamiento del espectro de fotoluminiscencia para un punto cuántico inmerso dentro de una microcavidad semiconductor y un campo magnético externo constante. La dinámica del operador densidad es calculada mediante la ecuación maestra escrita en la forma de Lindblad para los procesos decoherentes: emisión espontánea, pérdida a través de la cavidad y desfase. El sistema es alimentado mediante el mecanismo de bombeo incoherente de excitones. Se encuentra en el espectro de fotoluminiscencia que en campos magnéticos menores a ~ 2 T el sistema se comporta en un régimen de acoplamiento fuerte y para campos superiores a 2 T las líneas de campo magnético comienzan a desacoplarse comportandose como tres sistemas independientes. En especial, la línea que más rápido se desacopla es la línea σ_- .

The behaviour of the photoluminescence spectra of a single quantum dot in a semiconductor microcavity is modeled numerically in the presence of an external and constant magnetic field. The dynamics of the density operator is calculated using the master equation in the Lindblad form for decoherence processes: spontaneous emission, losses through cavity mirrors, and dephasing. An incoherent pumping of excitons is used to feed the system. It is found in the photoluminescence spectra that for magnetic fields lower than ~ 2 T the system is in the strong coupling regime and for magnetic fields greater than 2 T the system emits light like three independent systems. The line that uncouples faster is the σ_- line.

PACS: Quantum electrodynamics of cavities, quantum optics (Electrodinámica cuántica de cavidades, óptica cuántica), 42.50.Pq; Optical properties of nanostructures (Propiedades ópticas de nanoestructuras), 78.67.-n; Photoluminescence, properties and materials (Fotoluminiscencia, propiedades y materiales), 78.55.-m; Magnetic properties of quantum dots (Propiedades magnéticas de puntos cuánticos), 75.75.-c

I. INTRODUCCIÓN

El desarrollo de la física de semiconductores a nivel experimental permitió la creación de materiales que confinan carga eléctrica en una, dos o tres dimensiones, esto se ha logrado gracias al desarrollo de técnicas epitaxiales para el crecimiento de materiales [1–5] y técnicas litográficas avanzadas. Además, estas mismas técnicas permiten el control de la densidad de estados de luz en el interior de un semiconductor mediante variaciones espaciales de la función dieléctrica, creando el efecto de cavidad para la radiación electromagnética [6,7].

La creación de este tipo de sistemas físicos que combina confinamientos electrónicos y fotónicos, ha permitido la posibilidad de estudiar y probar la electrodinámica cuántica de cavidades en sistemas diferentes a los sistemas atómicos [8]. En el caso específico de confinamiento de carga eléctrica tridimensional, la estructura llamada punto cuántico (QD, del inglés: *Quantum Dot*), inmerso en una microcavidad semiconductor (MC), se evidencian fenómenos de acoplamiento entre dichos sistemas [9,10]. Por ejemplo, en el espectro de emisión de un sistema MC-QD, la emisión espontánea puede modificarse o incluso inhibirse si

el sistema se encuentra en alguno de los regímenes fuerte o débil de acoplamiento según la fabricación del sistema [11–14]. Un análisis de estos procesos de emisión permite el estudio de las propiedades no solo electrónicas al interior del punto, sino de determinar algunas las características de la luz que emite el sistema, como su estado cuántico y grado de acoplamiento radiación-materia, entre otras [15].

Un campo magnético constante aplicado sobre un QD afecta la frecuencia de emisión de los mismos, hecho que afecta la forma del espectro de emisión del sistema MC-QD [16], por lo tanto las variaciones de un campo magnético externo al sistema podrían ser utilizadas como parámetro control del espectro de emisión. Esto es importante en la implementación de protocolos de la óptica cuántica; protocolo de teletransporte cuántico [17], desarrollo de tecnologías de emisión o detección de un único fotón [18].

En la sección II se formula el modelo del sistema a estudiar, en la sección III se propone la dinámica del sistema, en la sección IV se presentan los resultados y en la sección V se muestran las conclusiones.

II. MODELO

Se estudia el comportamiento del espectro de fotoluminiscencia (PL, del inglés: *photoluminescence*) de un QD inmerso en una MC en presencia de un campo magnético externo aplicado paralelamente a la dirección de confinamiento (ver fig.1). Se considera el QD como un sistema de dos niveles y la MC con un solo modo de oscilación. Este sistema se modela como una versión modificada del Hamiltoniano de Jaynes-Cummings [19] donde un campo magnético externo produce efectos Zeeman y diamagnético en el QD modificando el comportamiento de las líneas de emisión de todo el sistema [16].

La figura 1 muestra el bosquejo del sistema físico MC-QD en presencia de un campo magnético externo. A semejanza de una cavidad unidimensional real, el efecto de confinamiento es logrado usando espejos de Bragg y el QD se encuentra en el centro de la microcavidad. En este bosquejo no se muestran los procesos disipativos.

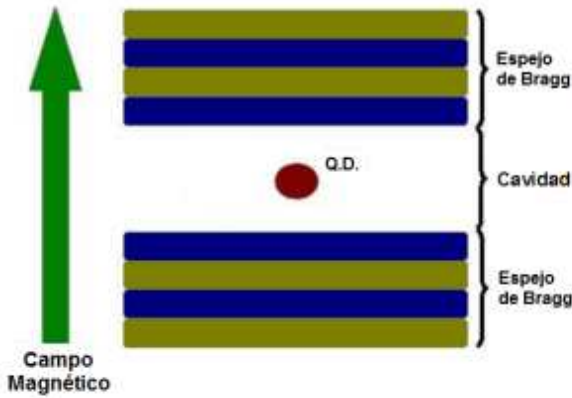


Figura 1. Bosquejo del sistema físico punto cuántico inmerso en una microcavidad unidimensional.

El Hamiltoniano en la aproximación de onda rotativa queda escrito como [20-22]:

$$H_{RWA} = \hbar\omega_c a^\dagger a + \hbar\omega_{Q.D.} \sigma^\dagger \sigma + \hbar g (\sigma a^\dagger + \sigma^\dagger a), \quad (1)$$

siendo $\hbar\omega_c$ la energía de resonancia de la cavidad, $\hbar\omega_{Q.D.}$ la energía de separación entre (dos) niveles del QD, $\hbar g$ la energía de acople entre la MC y el QD, a representa el operador de aniquilación de fotones, σ el operador de aniquilación de excitaciones en la materia. Específicamente, la energía de separación entre niveles del QD se modela como: $\hbar\omega_{QD} = \hbar\omega_{QD}(0) \pm \frac{1}{2}\alpha\mu_B B + \beta \times 10^{-3} B^2$, donde $\hbar\omega_{QD}(0)$ es la energía de separación entre estados del QD cuando el campo magnético es cero; los sumandos después del signo \pm representan el efecto Zeeman, donde la línea de emisión del QD se desdobra en dos (líneas denotadas por σ_+ y σ_-); y el efecto diamagnético, donde las líneas de emisión se mueven hacia el azul. Estos efectos existen cuando se tienen campos magnéticos positivos distintos de cero. Las constantes $\alpha = 2.9$ y $\beta = 0.6$ son usadas para ajustar los cálculos para un QD de InAs/GaAs [16] y μ_B es el magnetón de Bohr.

III. DINÁMICA

Para describir de manera más realista la dinámica de un sistema QD-MC es necesario considerar tanto la evolución que viene del operador Hamiltoniano como la interacción con su entorno. Para esto usaremos la formulación de Lindblad de la ecuación maestra escrita como [20,21]:

$$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar}[\rho, H_{RWA}] + L[\rho], \quad (2)$$

siendo ρ el operador densidad del sistema y L el operador de Lindblad que describe la dinámica del sistema, compuesto por la suma de los operadores que describen procesos de relajación en el sistema como son: pérdidas en la cavidad $\kappa(2a\rho a^\dagger - a^\dagger a\rho - \rho a^\dagger a)$, emisión espontánea $\gamma(2\sigma\rho\sigma^\dagger - \sigma^\dagger\sigma\rho - \rho\sigma^\dagger\sigma)$, desfase $\frac{1}{2}\gamma_\phi(\sigma_z\rho\sigma_z - \rho)$, además del proceso de bombeo incoherente de excitones en el QD $\frac{1}{2}P(2\sigma^\dagger\rho\sigma - \rho\sigma\sigma^\dagger - \sigma\sigma^\dagger\rho)$.

La solución de este sistema fue implementada en el lenguaje Python con la extensión QuTip [23], desarrollada para resolver la dinámica de sistemas cuánticos abiertos. Para el cálculo de espectro de fotoluminiscencia se utiliza la expresión $S(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \lim_{t \rightarrow \infty} \langle a^\dagger(t+\tau)a(t) \rangle e^{-i\omega\tau} d\tau$ [22], que es la transformada de Fourier de la función de correlación a dos tiempos $\langle a^\dagger(t+\tau)a(t) \rangle = \text{Tr}(a^\dagger(t+\tau)a(t)\rho)$, este cálculo se resuelve en Qutip usando el comando "spectra" [23].

IV. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Los parámetros necesarios utilizados para hacer los cálculos fueron la energía de la cavidad $\hbar\omega_c = 1333.0$ meV [16], la separación inicial de los niveles de energía del QD $\hbar\omega_{Q.D.}(0) = 1333.0$ meV [16], el parámetro de acoplamiento radiación-materia $\hbar g = 25 \times 10^{-3}$ meV, la tasa de disipación de la cavidad $\kappa = 1.0 \times 10^{-3}$, la tasa de disipación de la excitación del QD $\gamma = 1.0 \times 10^{-3}$, el término de desfase $\gamma_\phi = 1 \times 10^{-3}$ y la tasa de bombeo incoherente de excitaciones $P = 1.0 \times 10^{-6}$.

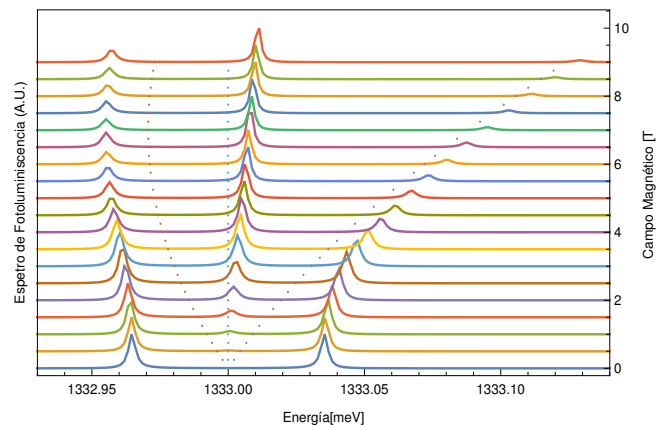


Figura 2. Espectro de fotoluminiscencia de un sistema QD-MC para diferentes valores de campo magnético constante. Las líneas punteadas de izquierda a derecha representan el comportamiento de las líneas del QD (σ_+ , σ_-) y de la cavidad que debería seguir el sistema en presencia de campo magnético al estar desacoplado el punto cuántico de la cavidad.

La figura 2 muestra el espectro de fotoluminiscencia en función de la energía de emisión de un sistema QD-MC

en presencia de campo magnético externo constante y el comportamiento de los QD en presencia de un campo magnético externo aplicado paralelo a la dirección de confinamiento de la cavidad, para campos magnéticos de cero a 9 T, en incrementos de 0.5 T. En la Figura 2, se observa que para campos magnéticos menores a ~ 2 T se obtiene el comportamiento típico del espectro de luminiscencia asociado a un sistema acoplado; en donde se encuentran dos picos en el espectro de luminiscencia. Esto se debe a que campos magnéticos de intensidades menores a ~ 2 T mantienen el acoplamiento entre las líneas de emisión del QD y la MC, sin embargo cuando se incrementa el campo magnético el sistema deja de estar en resonancia, por lo tanto el acoplamiento desaparece y así el sistema se comporta como tres emisores independientes; cavidad, línea de emisión σ_+ y línea de emisión σ_- para el QD. La razón física de este comportamiento se debe al efecto Zeeman inducido por la interacción del sistema con el campo magnético externo, este efecto es evidenciado porque se observa un rompimiento del degeneramiento del sistema, sin embargo también se observa una asimetría entre la línea central y las líneas laterales debido a los términos Zeeman y diamagnético definidos en el Hamiltoniano del QD.

V. CONCLUSIONES

En este trabajo se estudió el comportamiento de un sistema MC-QD en presencia de un campo magnético externo. Se encontró que a partir de un valor de ~ 2 T existe desacople entre las líneas de emisión del sistema. Se muestra que la línea σ_- del QD se desacopla más rápidamente con la cavidad.

AGRADECIMIENTOS

A. Portacio reconoce el apoyo financiero de Universidad de los Llanos, bajo el proyecto *Cálculo de la respuesta óptica en nano-estructuras usando una ecuación maestra en la forma Lindblad*, código C01-F02-010-2017. L. E. Cano y P. S. S. Guimarães reconocen el apoyo financiero de CAPES y CNPq, Brasil.

REFERENCIAS

- [1] B. Daudin, F. Widmann, G. Feuillet, Y. Samson, M. Arlery, J. L. Rouvière, Phys. Rev. B **56**, R7069(R) (1997).
- [2] K. Yamaguchi, K. Yujobo, T. Kaizu, Japanese J. Appl. Physics **39**, L1245 (2000).
- [3] A. D. Yoffe, Adv. Phys. **51**, 799 (1993).
- [4] R. D. Dupuis, P. D. Dapkus, N. Holonyak Jr., E. A. Rezek, R. Chin, Appl. Phys. Lett. **32**, 295 (2008).
- [5] P.N. Butcher, N. H. March, y M. P. Tosi, Physics of low-dimensional semiconductor structures. (Springer Science & Business Media, 2013), pp 1 - 56.
- [6] J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn, R. D. Meade, Photonic crystals: molding the flow of light, 2da Ed. (Princeton University Press, 2011), pp. 44-52.
- [7] K. J. Vahala, Optical microcavities, Nature **424**, 839 (2003).
- [8] J.M Gérard y B. Gayral, InAs quantum dots: artificial atoms for solid-state cavity-quantum electrodynamics, Physica E **9**, 131 (2001).
- [9] A. Ishikawa, Y. Arakawa, C. Weisbuch y M. Nishioka, Phys. Rev. Lett. **69**, 3314 (1992).
- [10] R. J. Warburton, Cont. Phys. **43**, 351 (2002).
- [11] J. P. Reithmaier, G. Sek, Löffler, A., Hofmann, C., Kuhn, S., Reitzenstein, S., y A. Forchel, Nature **432**, 197 (2004).
- [12] T. Yoshie, A. Scherer, J. Hendrickson, G. Khitrova, H.M. Gibbs, G. Rupper, C. Ell, O.B. Schekin, D.G. Deppe, Nature **432**, 200 (2004).
- [13] G.S. Solomon, M. Pelton, Y. Yamamoto, Phys. Stat. Sol. **244**, 2792 (2007).
- [14] K. Hennessy, A. Badolato, M. Winger, D. Gerace, M. Atatüre, S. Gulde, A. Imamoglu, Nature **445**, 896 (2007).
- [15] Z. Di, H. V. Jones, P. R. Dolan, S. M. Fairclough, M. B. Wincott, J. Fill, G. M. Hughes, J. M. Smith, New J. Phys. **14**, 103048 (2012).
- [16] H. Kim, T. C. Shen, D. Sridharan, G. S. Solomon, E. Waks, Appl. Phys. Lett. **98**, 091102 (2011).
- [17] J. L. O'Brien, A. Furusawa, J. Vuckovic, Nature Photonics **3**, 687 (2009).
- [18] P. Michler, A. Kiraz, C. Becher, W.V. Schoenfeld, P.M. Petroff, L. Zhang, E. Hu, A. Imamoglu, Science **290**, 2282 (2000).
- [19] E.T. Jaynes, F.W. Cummings, Proc. IEEE. **51**, 89 (1963).
- [20] H. P. Breuer y F. Petruccione, The theory of open quantum systems, 1ra Ed. (Oxford University Press, 2002), pp.109, 254.
- [21] H. J. Carmichael, Statistical Methods in Quantum Optics 1: Master Equations and Fokker-Planck Equations 1ra Ed. (Springer, 2003), pp.22, 281.
- [22] M.O. Scully y M.S. Zubairy, Quantum Optics, 1ra Ed. (Cambridge University press, 1999) pp.151,302.
- [23] J. R. Johansson, P. D. Nation, F. Nori, Comp. Phys. Comm. **183**, 1760 (2012).

This work is licensed under the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0, <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0>) license.



INTEGRACIÓN DE HARDWARE LIBRE COMO HERRAMIENTA EDUCATIVA PARA INVESTIGAR LA RESPUESTA EN EL TIEMPO DEL CIRCUITO RLC EN SERIE

INTEGRATING FREE OPEN SOURCE HARDWARE AS EDUCATIONAL TOOL TO INVESTIGATE THE RLC CIRCUIT TIME RESPONSE

E. SERRANO-PÉREZ[†]

UNITEC MÉXICO - Campus Atizapán, Universidad Tecnológica de México; edgar_serrano@my.unitec.edu.mx[†]

[†] autor para la correspondencia

Recibido 28/9/2018; Aceptado 8/11/2018

PACS: Laboratory computer use (Uso de computadores de laboratorio) 01.50.Lc; laboratory experiments for education in Physics (Experimentos de laboratorio para la enseñanza de la Física), 01.50.Pa; Laboratory experiments and apparatus (Experimentos y aparatos de laboratorio), 01.50.Pa

La física es una ciencia que se encuentra presente en una gran parte de los fenómenos de estudio de las carreras de ingeniería mecánica, eléctrica, sistemas de cómputo y electrónica; tal es el caso de la ingeniería Mecatrónica impartida en la UNITEC Atizapán México donde la materia de Diseño Mecatrónico implica el modelado de sistemas como una etapa fundamental del ciclo del diseño Mecatrónico. Como un caso práctico de estudio para el modelado e identificación de sistemas se ha propuesto el sistema Resistor - Inductor - Capacitor (RLC) en serie, el cual es un sistema ampliamente analizado en las materias de física general y análisis de circuitos durante las etapas tempranas de las carreras de ingeniería [1,2]. Generalmente se utiliza un modelo numérico para analizar y comprender el comportamiento del sistema; como una mejora en el proceso de aprendizaje para los alumnos, se propone una tarjeta Arduino Uno como una tarjeta de adquisición de datos de bajo costo [3,4] para ser utilizada en ámbitos académicos y educativos en la formación de recursos humanos que sean capaces de interactuar con elementos de hardware y software libre a fin de mejorar sus habilidades técnicas y de análisis. El diagrama de conexión se puede observar en la figura 1.

Tal y como se muestra en la imagen, se utiliza el pin A0 para poder adquirir la señal del voltaje de salida del capacitor. Esto permite la identificación de la respuesta a un escalón de 3.3 V desde que está totalmente descargado hasta alcanzar el estado estacionario en un nivel cercano al de la entrada del sistema. El circuito eléctrico en serie está compuesto por una resistencia equivalente de 374Ω (dos resistencias comerciales de 180Ω nominal en serie), el embobinado primario de un transformador 127 VAC a 9 VAC ha sido utilizada como bobina; la inductancia ha sido medida en 4.38 H con una resistencia interna de 470Ω , finalmente el valor medido del capacitor es de $10.5 \mu\text{F}$.

Los objetivos de este trabajo se pueden resumir de la siguiente manera:

- Que los alumnos sean capaces de montar su propio experimento y utilizar la tarjeta Arduino como tarjeta de adquisición de datos portátil y de bajo costo.
- Los alumnos sean capaces de analizar un sistema físico a través de una simulación numérica y métodos experimentales con el fin de contrastar los resultados obtenidos.
- El uso de herramientas de software y hardware libre deben motivar a los alumnos a preparar sus propios sistemas de análisis y adaptar sus experimentos de acuerdo a sus intereses y necesidades de estudio.

El experimento utilizado en este trabajo tiene la ventaja de ser aplicado como herramienta educativa ya sea manera individual o grupal con hasta 3 integrantes, dado que solo es necesario utilizar una Tarjeta Arduino, una tablilla de prototipos, una resistencia, un capacitor y un transformador, además de los cables de conexión, los costos son bastante accesibles para los estudiante tal y como se muestra en la Tabla :

Tabla 1. Some radionuclides are used as radioactive tracers

#	Nombres	Costo en USD	Total
1	Tarjeta Arduino Uno	\$9.25	\$9.25
1	Tablilla Prototipos	\$1.62	\$1.62
1	Capacitor $10\mu\text{F}$	\$0.21	\$0.21
2	Resistor 180Ω	\$0.10	\$0.20
1	Transformador 12V/500mA	\$0.21	\$0.21
		\$5.20	\$5.20
		TOTAL=	\$16.48

Como puede observarse el costo para realizar este experimento es menor a los \$17 USD, un precio total bastante atractivo para los alumnos, muy por debajo de equipos comerciales utilizados con fines similares, incluso en este caso

el software utilizado es libre y el único costo debe ser cubierto para los componentes físicos de la práctica.

(V_{in}) del circuito RLC en serie es la siguiente [5].

$$\frac{V_{cap}(s)}{V_{in}(s)} = \frac{1}{LCs^2 + RCs + 1} \quad (1)$$

Donde L representa la inductancia del inductor en henry (H), C representa la capacitancia del capacitor en farad (F) y R la resistencia en ohm (Ω). El código fuente de Arduino utilizado durante el desarrollo de esta herramienta educativa se presenta en la Figura 2.

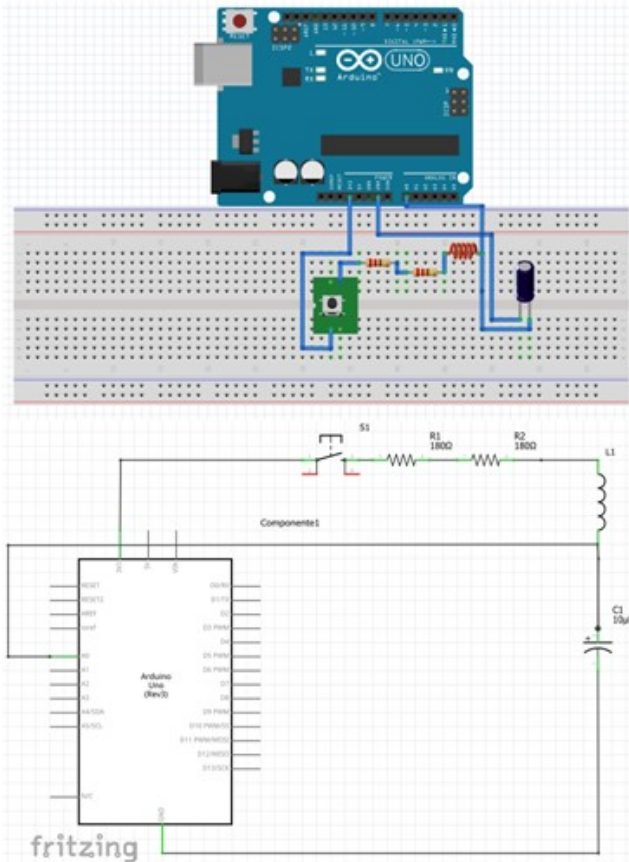


Figura 1. Vista de conexión del circuito RLC en serie en una tablilla de prototipos y esquemático utilizando el programa Fritzing.

Para realizar la adquisición de datos, se ha utilizado el siguiente programa que permite realizar la conversión Analógico digital a través del pin A0 de la tarjeta Arduino Uno, Se realiza un muestreo de la señal cada aproximadamente 10 milisegundos. La función millis () permite monitorear el tiempo en que se ejecuta cada ciclo de la adquisición de datos como

se muestra en la imagen; además el programa permite desplegar en el monitor serie del entorno Arduino una columna izquierda que presenta el tiempo en milisegundos y una columna derecha donde se muestra el voltaje obtenido de las terminales del capacitor. Como entrada escalón al sistema se ha utilizado la misma fuente de voltaje de 3.3 V que provee la placa Arduino Uno, en esta ocasión debido al sobre impulso que puede tener la señal de salida del capacitor, al utilizar la fuente de 5 V como entrada al circuito se podría llegar a sobre pasar los 5 V permitidos en los pines de la tarjeta Arduino Uno, provocando daños permanentes. Para poder predecir y comparar los resultados experimentales con los resultados teóricos, se ha utilizado el programa Scilab, donde se programó la función de transferencia en el dominio de Laplace (s) que representa la relación que existe entre el voltaje de salida del capacitor (V_{cap}) y la entrada del sistema

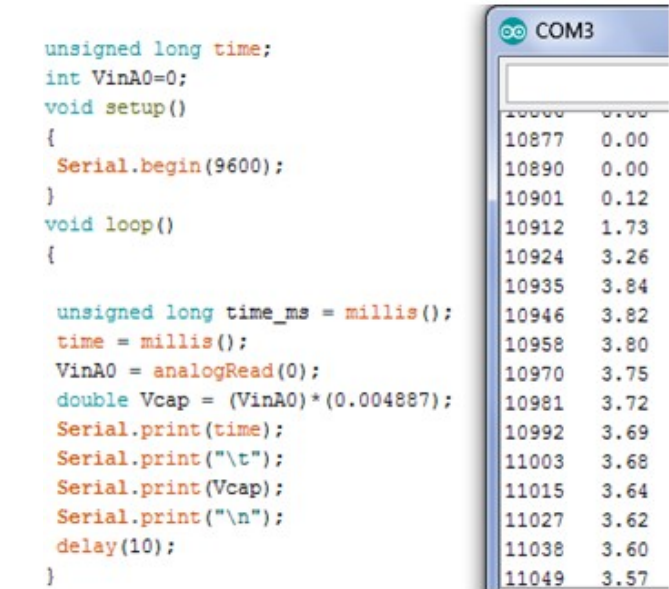


Figura 2. Códigos fuente del programa de adquisición de datos utilizando el pin A0 de la Tarjeta Arduino Uno.

A partir de los resultados de la simulación se puede observar el sobre impulso que se genera al aplicar una entrada de tipo escalón de 3.3 V al sistema RLC en serie. El programa les ha permitido a los estudiantes visualizar los resultados aproximados que se esperan obtener al aplicar la entrada escalón físicamente al circuito.

Los resultados obtenidos de la identificación experimental y la simulación numérica son similares y cercanos entre sí; se debe de considerar que un modelo matemático es una representación numérica aproximada que describe a un sistema y que permite su estudio y análisis para predecir su comportamiento. En este sentido, se ha observado que los estudiantes una vez que terminan de analizar un determinado caso, comienzan a sugerir cambios en los parámetros para observar cómo afecta determinado cambio en la dinámica del sistema, los alumnos sugirieren hacer cambios en los valores de la resistencia, el capacitor o el inductor para observar "que sucede". La simulación numérica les permite predecir el comportamiento del sistema para conocer el efecto que puede tener la modificación de uno o varios parámetros antes de conectar el sistema e identificar su respuesta utilizando instrumentación electrónica, los alumnos pueden comparar los resultados obtenidos y realizar un contraste con lo que se obtiene a través de una

solución numérica y lo que se obtiene en un sistema real [6]. El hecho de poder anticiparse de manera aproximada al comportamiento del sistema, ya sea en el estado transitorio o estacionario evita el daño de equipos y sistemas de adquisición de datos.

Los estudiantes se ven favorecidos en el proceso de enseñanza-aprendizaje ya que son capaces de manipular e identificar un sistema físico utilizando herramientas de bajo costo que les permiten coleccionar datos y utilizarlos para representar el comportamiento de un sistema físico a través de una computadora [7].

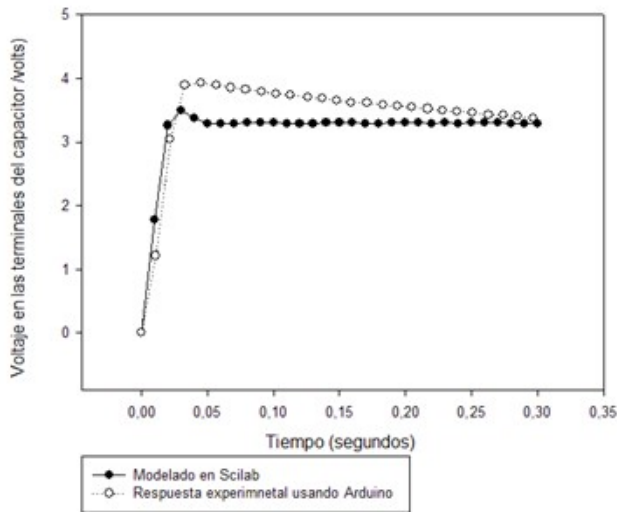


Figura 3. Comparación entre resultados numéricos y experimentales en la respuesta a un escalón de 3.3 V en un circuito RLC en serie.

Para este caso, al utilizar la tarjeta Arduino Uno se deben seleccionar los parámetros de los elementos para que en el estado transitorio no se sobrepasen los valores de voltaje el rango de los 0 a 5 volts que permite utilizarse en los pines de la tarjeta Arduino; el utilizar voltajes negativos o mayores a los 5 V en las entradas de los pines podría dañar tarjeta, para remediar la situación sería necesario un arreglo eléctrico intermedio como interface, lo cual podría incluso elevar la complejidad del experimento con fines didácticos y desviar la atención hacia el comportamiento físico del sistema que se desea analizar. En la figura 3

se puede observar la comparación entre los resultados obtenidos utilizando la función de transferencia para el sistema utilizando el programa de modelado Scilab y los resultados experimentales utilizando la tarjeta Arduino Uno como una tarjeta de adquisición de datos.

I. CONCLUSIONES

En conclusión, en este trabajo se presenta la integración de software y hardware libre para el análisis numérico y experimental del circuito RLC en serie, el cual es frecuentemente presentado en cursos de física y análisis de circuitos en etapas tempranas de programas de ingeniería.

El costo para poder implementar esta práctica es inferior a \$17 USD, muy por debajo de paquetes comerciales, lo cual lo hace la práctica accesible que puede ser adaptada para distintos propósitos académicos y educativos en escuelas y laboratorios de física. La práctica le permite a los alumnos implementar y utilizar su propio sistema de estudio a partir de la tarjeta Arduino Uno utilizada como tarjeta de adquisición de datos de bajo costo, con lo cual se incrementa el desarrollo de las habilidades técnicas y de análisis de datos al comparar tanto resultados numéricos como experimentales y sacar conclusiones de sus observaciones a partir de un sistema físico real.

REFERENCIAS

- [1] R. A. Serway and J. W. Jewett, Physics for scientists and engineers, Brooks/Cole Publishing Co., 2011.
- [2] J. W. Nilsson and S. Riedel, Electric circuits (8th edition), Prentice-Hall, Inc., 2007.
- [3] J. A. Lesteiro-Tejeda, D. Hernández-Delfín and A. J. Batista-Leyva, Rev. Cubana Fis. **34**, 5 (2017).
- [4] D. Nichols, The Physics Teacher **55**, 226 (2017).
- [5] K. Ogata, Modern control engineering, Prentice Hall PTR, 2001.
- [6] P. A. Lonngi Villanueva and M. D. Ayala Velázquez, Rev. Cubana Fis. **24**, 4 (2007).
- [7] S. García Dally, F. Martínez Oliva and M. Navarro Fernández, Rev. Cubana Fis. **26**, 5 (2009).

This work is licensed under the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0, <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0>) license.



NOBEL PRIZE IN PHYSICS 2018 AWARDED “FOR GROUND-BREAKING INVENTIONS IN THE FIELD OF LASER PHYSICS”

PREMIO NOBEL DE FÍSICA 2018 OTORGADO “POR INVENCIONES INNOVADORAS EN EL CAMPO DE LA FÍSICA LÁSER”

J-P. GALAUP[†]

Emeritus Director of Research at CNRS, Laboratory Aimé Cotton, Paris Sud and Paris Saclay Universities, France; jean-pierre.galaup@u-psud.fr[†]

[†] corresponding author

Recibido 5/11/2018; Aceptado 15/11/2018

After a brief presentation of the Physics Nobel Prize 2018 and its winners, the paper is divided into two main parts. In the first one, the foundations of the optical tweezers are described, and a few of its applications are reviewed in some detail. The second part of the article discusses the physics beyond the technique for obtaining ultrashort, powerful laser pulses, and some of its applications are mentioned.

Después de una breve presentación del Premio Nobel de Física 2018 y sus ganadores, el artículo se divide en dos partes principales. En la primera, se describen los fundamentos de las pinzas ópticas, y se revisan con cierto nivel de detalle algunas de sus aplicaciones. En la segunda parte, se discute la física que sustenta la técnica para obtener pulsos láseres ultra-cortos y muy potentes, y se mencionan algunas de sus aplicaciones.

PACS: 42.50.Wk Mechanical effects of light on material media, microstructures and particles (Efectos mecánicos de la luz en los medios materiales); 42.62.b Laser applications (Aplicaciones de los láseres); 42.62.Be Biological and medical applications (Aplicaciones médicas y biológicas); 42.65.Re Ultrafast processes (Procesos ultrarrápidos); Optical pulse generation and pulse compression (Generación óptica de pulsos y compresión de pulsos); 87. Biological and medical physics (Biofísica y Física médica); 87.80.Cc Optical trapping (Trampas ópticas)

The Nobel committee has selected this year two important areas in laser physics which have contributed and continue contributing to the development of remarkable applications concerning the fields of physics and chemistry, biology, biophysics and medicine. The prize has been divided in two parts. One half awarded to Prof. Arthur Ashkin (96 years old!) from USA for all his work on radiation pressure, the invention of the optical tweezers and their remarkable use for the study of biological systems. The second half awarded to Prof. Gérard Mourou (74 years old) from France, shared with his former student Donna Strickland (59 years old) from Canada, for their method to produce ultra short light pulses with high intensities.

As the possibilities for selecting every year the best possible candidates are very restricted, one can guess that the choice made this year is a relatively good compromise: two different continents, a woman among the selected researchers (Donna Strickland being the third one in Physics after Marie Skłodowska-Curie in 1903, and Maria Goeppert-Mayer in 1963), and the recognition of important developments in fundamental physics with broad applications notably in biology and medicine, especially eye surgery.

I. FROM LIGHT PRESSURE TO THE OPTICAL TWEEZERS

Suspected as early as the 17th century based on Kepler's observations of the comet tails always facing the sun (Fig. 1), and then on Maxwell's electromagnetic theory, the fact that light exerts forces on objects was experimentally

demonstrated by Lebedev in the 19th century. However, being considered too weak to be exploitable, these forces remained a mere curiosity until the invention of the laser in the 1960's.

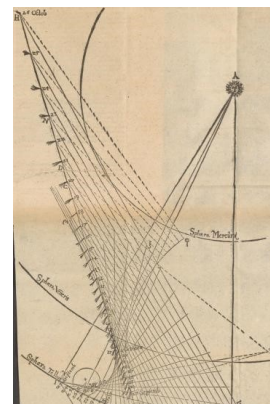


Figure 1. Suspecting the mechanical action of light. **Left:** Johannes Kepler (1571-1630). **Right:** In 1610, Kepler's observations suggest for first time the idea that light could have a mechanical action on matter. (Image extracted from “De cometis” published in 1619 reporting Kepler's observations between 1607 until 1618)

From then on, the evolution was rapid and continuous thanks to the works around which Arthur Ashkin's (Fig. 2) name has been often cited: the first realizations in the 1970s of optical traps using two counter-propagating beams [1], first experiments on the optical levitation of micro spheres [2], first trapping of atoms by resonance radiation pressure [3], first observation of optically trapped atoms [4] and the first stable

optical tweezers in 1986 using a single laser beam strongly focused by a high numerical aperture microscope objective, which created an optical gradient force [5]. So 1986 can be taken as the birthday of the optical tweezers.



Figure 2. A long quest for optical tweezers. **Left:** Arthur Ashkin at the time of his discovery. **Right:** When he was 90 years old.

1.1. Optical tweezers in Biology and Medicine

The use of a laser beam focused through a microscope objective to manipulate tiny objects therefore suggested

many potential applications to biology. It was again Ashkin who started to innovate in this field by performing the first manipulations of viruses and bacteria or organelles inside the cell cytoplasm. Also, Arthur Ashkin developed the first applications in the field of medicine, including the problem of sterility and human fertility [6].

On the one hand, optical tweezers allow the precise manipulation of objects without any mechanical contact, so the object may remain in a perfectly sterile environment during its manipulation. On the other hand, the forces generated by the optical tweezers are typically equivalent to those involved in a large number of cellular processes (adhesion, cytoskeleton mechanics, molecular motors, etc.). This is why the development of optical tweezers has been and continues to be very dominant in the field of biological applications. However, it is also applied in other fields of photochemistry or physics, such as the study and control of colloidal particles, polymerization or crystalline growth, or the setting in motion and control of micro motors or micro pumps.

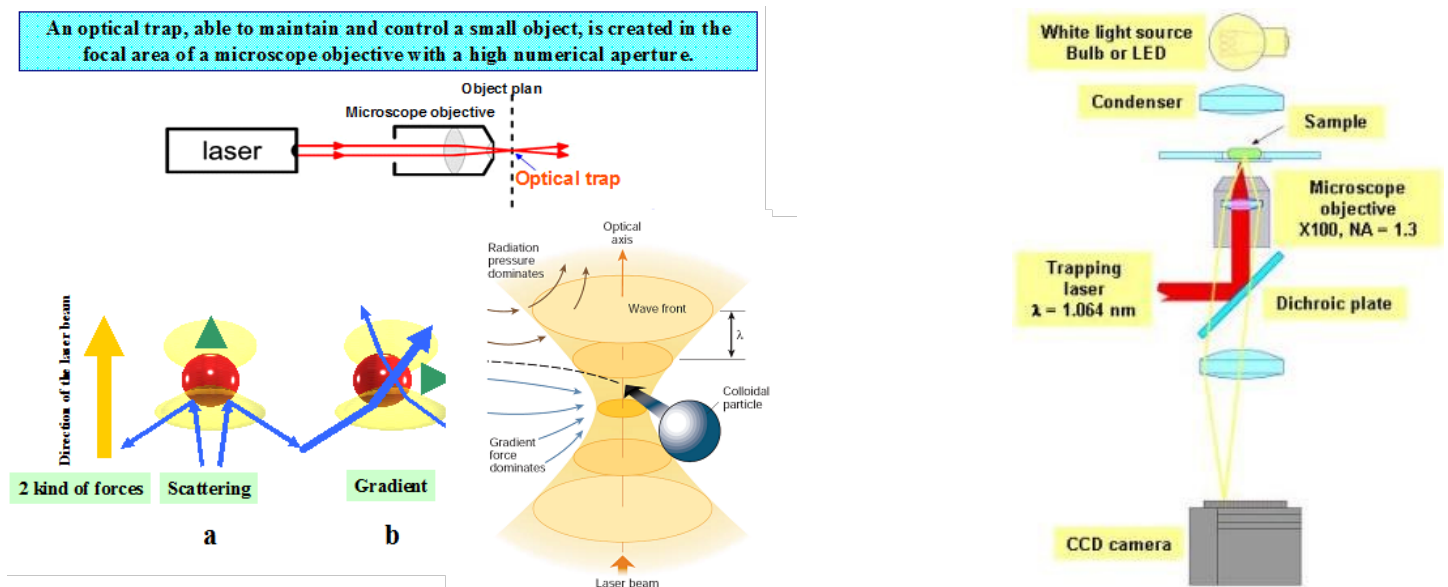


Figure 3. The working principle of the optical tweezers. **Left:** A laser beam is directed at the rear back side of a high numerical aperture microscope objective, and as the beam converges to a diffraction limited spot, mesoscopic dielectric particles in the light path are confined near the focal point. (a) The light exerts an upward force on the sphere (radiation pressure). (b) The light exerts a lateral force to the right on a sphere with refraction index higher than the surrounding. The resulting force pushes the particle towards the region of maximum light intensity, i.e., the particle is trapped into that region close to the focal point of the objective. **Right:** A complete scheme of an optical tweezers experiment based on the use of an inverted optical microscope commonly used by biologists.

1.2. Applications on individual DNA and RNA molecules

The dynamic studies at the level of single DNA or RNA molecules have progressed significantly thanks to manipulations using optical tweezers. Thanks to them, it is possible today to measure the force applied to a DNA molecule which is fixed at one of its ends to the surface of a sample holder and at its other end to a latex ball that is held by an optical clamp (optical tweezers). Also, single DNA can be attached to two balls clamped in optical tweezers [7]. Then, it is possible to directly measure the elasticity of the DNA

molecule (Fig. 4a).

Other application has been the study of RNA polymerase molecules responsible for the transcription of the content of the DNA into messenger RNA [8,9]. During transcription, the RNA polymerase molecule moves along the DNA strand to form the messenger RNA step by step and it is possible to detect this movement with angstrom precision by binding a latex sphere to the RNA polymerase molecule (Fig. 4b), since the displacement of this molecule affects the position of the ball in the optical trap. The separation of the double

helix from the DNA is achievable through the action of a mechanical force exerted with an optical clamp. It has thus been possible to determine the force with which the base pairs are bound and it has been established that these forces vary according to the sequence of base pairs.

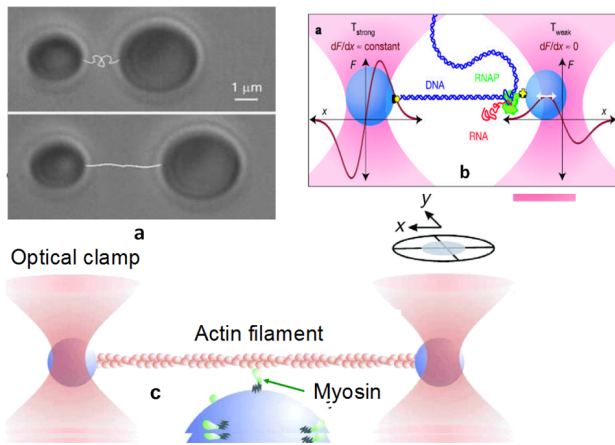


Figure 4. Manipulation of individual molecules (a) Principle of measuring the elasticity of the DNA molecule [7]. (b) A RNA polymerase molecule is bound to a latex microsphere trapped in an optical clamp. [8, 9] (c) A single actin filament is suspended between two latex beads held in position by two optical traps. A molecule of myosin interacts with the filament along which it can move, allowing the study of the forces involved in muscle contraction [10]

Many biological processes involve the transformation of chemical energy into mechanical energy through the so-called molecular motors. Processes such as intracellular transport, bacterial motion, DNA replication or muscle contraction involve different types of molecular motors. Biological motors [10] are excellent model systems for studying protein motions or their conformational changes. In particular, many studies concern the problem of the action of muscle fibers where molecules such as kinesin or myosin act. A prototype system often studied consists of an actin filament attached at its ends to latex beads, themselves held in position by two optical traps (Fig. 4c).

1.3. Cell manipulations

This is an area where many experiences have been done since the very beginning of the optical tweezers. Due to the fact that light beams easily cross cell membranes, chromosomes, mitochondria and other intracellular organelles can be manipulated by optical tweezers. Cellular functioning has been the subject of many studies. In particular, one can note the studies on the influence of a stress caused to a cell that has been trapped by latex beads which are collectively controlled by several laser beams to exert a pressure around it and therefore acting on its metabolism. Other studies on cells combine optical tweezers with microsurgical or micro-scalpel microsurgery, or with the use of fluorescent probes that are positioned in specific areas of the cell. An interesting application is the study of gametes and spermatozoa and the

action that optical tweezers can provide to help human or animal fertility [6] (Fig. 5 top).

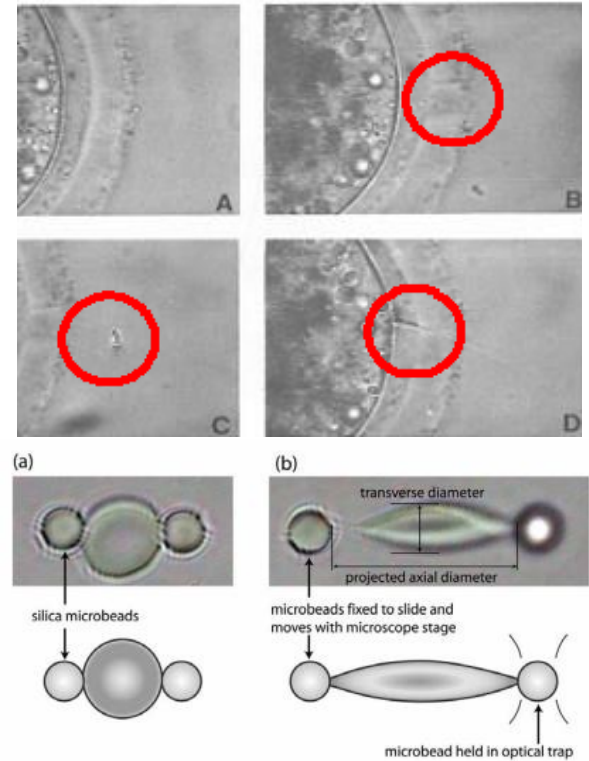


Figure 5. Manipulation of individual cells. **Top:** Helping fertilization with optical tweezers. (a) The optical manipulation of mobile cells such as spermatozoa for the measurement of their flagellar propulsion force is a diagnostic tool for certain types of sterility. Details of the left figure: Laser zona drilling and sperm insertion. (A) Cattle oocyte with intact zona pellucida. (B) Oocyte after drilling a hole into the zona pellucida; note the sharp edges of the channel. (C) Trapped sperm before insertion into the perivitelline space of the oocyte (sperm head in and sperm tail out of focus). (D) Inserted sperm in close contact to the oocyte membrane [6]. **Bottom:** Viscoelastic properties of stretched cells: a red globule with two balls in diametrically opposite positions is deformed by increasing the distance between the traps. The optical image shows an example of large deformation of a cell at 193 pN of force [11].

By providing precise control of the forces exerted on the cell membranes, optical tweezers contributed to a better knowledge of their viscoelastic properties (Fig. 5 bottom). Examples include the study of the elasticity of the red blood cell membrane to understand how the absence or the abnormality of some membrane proteins can lead to a persistent deformation of a globule likely to favor its premature destruction [11].

1.4. Non-biological applications: nano- and micro-motors

Another major area of applications of optical tweezers is the study and realization of nano- or micro-motors (Fig. 6), a research topic where much work is focused on the different possibilities to use light for set in rotation small objects, controlling their speed and their direction of rotation. The various applications are strongly related to micro-fluidics: circulation engines, agitators, valves, local viscometers, etc. The driving idea of this research in micro-fluidics often

combined with the use of optical tweezers is the production of micro-laboratories or “lab-on-a-chip”. In the understanding of colloidal systems, this technique has already demonstrated its great utility for studying their dynamical behavior and the interactions between colloidal particles.

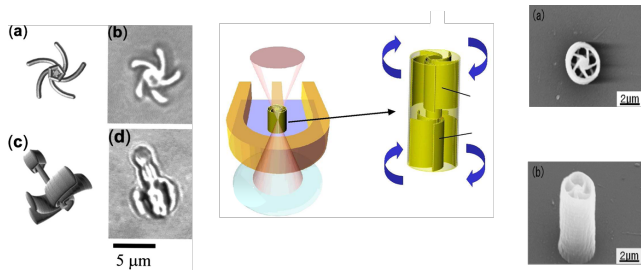


Figure 6. Laser-animated nano-devices. Left: realization of nano-motors animated by the laser beam of an optical tweezers. The rotor starts rotating in the vicinity of the focus of the microscope objective and the direction of rotation changes depending on whether the rotor is above or below the focus [12]. Center: illustration of a U-shaped micro channel in which it is placed a micro pump whose practical realization is shown on the right [13].

The action of light is not limited to the ability to capture an object. Other situations are explored as the possibility of “making fly.” an object with the shape of an airplane wing, the flow of photons providing the required lift. Other situations are achieved like those using some particular configurations of beams that according to the size or the refractive index of the micro objects, some are attracted when others are repelled by the light, realizing then an automatic and effective sorting within a mixture of different objects.

All in all, it is difficult to end up this section with any conclusions, since the research and technology based on radiation pressure and optical tweezers is a still extremely active field of research.

II. ULTRASHORT AND POWERFUL OPTICAL PULSES

As pointed out before, Gérard Mourou (Fig. 7 left), professor and member of the Haut-collège of the École Polytechnique in Palaiseau (France) receives the second half of the Nobel Prize in Physics 2018. He shares this award with the Canadian Donna Strickland (Fig. 7 right) for jointly developing a method for the generation of ultrashort optical pulses with extreme high intensity [14, 15].



Figure 7. The creators of the “Chirped Pulse Amplification” technique. **Left:** Gérard Mourou. **Right:** Donna Strickland.

Gérard Mourou spent a large part of his career in the United States, and in particular at the University of Michigan where he is now an emeritus professor. Upon his return to France in 2005, he led the Laboratory of Applied Optics belonging to ENSTA ParisTech/CNRS/École polytechnique) until 2008.

It is at the origin of three major initiatives concerning high power lasers: the launch of the XCAN project at the Ecole Polytechnique, the Apollon laser on the Saclay plateau and the great European infrastructure ELI (Extreme Light Infrastructure) which will house the most powerful lasers of the world in Hungary, Romania and the Czech Republic. He is also director of the International Zetta-Exawatt Science and Technology (IZEST), which associates 27 laboratories around the world to anticipate the future of high-power lasers.

II.1. Chirped Pulse Amplification

Chirped Pulse Amplification is one of those extremely clever tricks which are easier to say than to do in the laboratory, so it is impressive that Gérard Mourou and Donna Strickland were able to make it work. After demonstrating it, many other researchers started imitating and refining the technique, which has found applications all over physics, and even in medicine.

The Chirped Pulse Amplification principle (CPA) works as follows: an oscillator produces short pulses at low intensity. Firstly, the ultrashort pulses are temporally spread by using an optical stretcher (about 10,000) consisting of two gratings to reduce their instantaneous intensity. Such long pulses are now safe for amplification in an amplifier material without damaging it. The pulse is then recompressed to reach intensities that classic amplification techniques would not achieve. The CPA technique allowed very quickly gaining 10 orders of magnitude in laser power. This discovery has contributed to the advancement of science in several fields, in particular, by making it possible to manufacture increasingly intense lasers to probe matter. Adapted to the medical field, the CPA technique has also allowed advances in the field of refractive surgery of the eye and the treatment of cataract.

II.2. Understanding the cleverness of Mourou and Strickland invention

The technique, Gérard Mourou and Donna Strickland invented was a part of Strickland’s thesis research, and is nowadays universally known as CPA. It is founded on one of the central facts of wave physics, namely that making pulses with a short duration in time requires a wide spread in frequency. Mourou and Strickland exploited this frequency spread in a clever way to circumvent the limits imposed by the fact that too high intensities can damage the crystals used to amplify laser pulses.

An important point to understand is why the generation of short pulses needs a wide range of frequencies. First one can look at what happens when adding pulses of light with slightly different frequencies. Fig. 8 (top panel) shows a single

frequency wave at the bottom, with combinations of 2, 3, and 5 slightly different frequencies above it [16].

When adding a second frequency, the single smooth wave breaks up into a series of beats regions where there is some wave behaviour separated by regions where the two different frequencies cancel each other out.

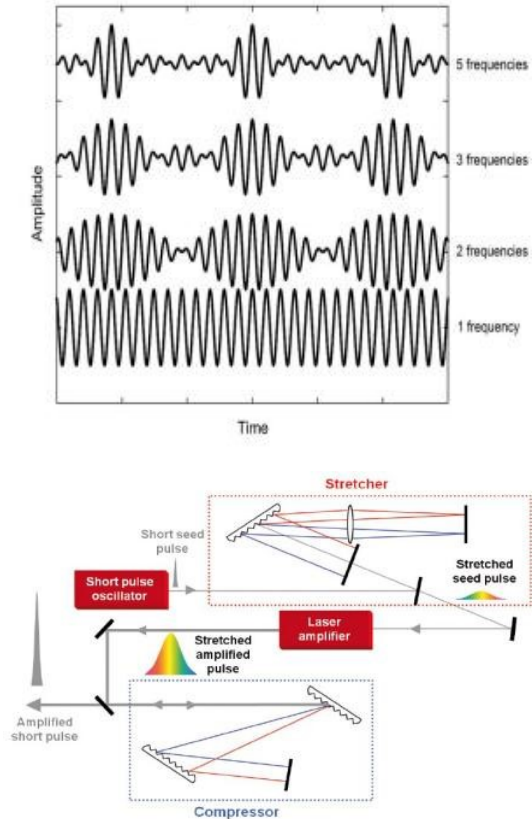


Figure 8. How chirped-pulse amplification works. **Top:** Creating narrow pulses of light by addition of waves with slightly different frequencies [16]. **Bottom:** Conceptual scheme of a chirped-pulse amplification based on a conventional laser system at 800 nm [17].

As more frequencies are added, the general beat structure remains, but the width of the region with obvious wave behaviour gets smaller. This is a very general phenomenon relating to waves, and applies to anything with wave nature: sound waves, light waves, even the matter waves associated with quantum-mechanical particles. When adding together lots of waves with slightly different frequencies, you end up with a series of narrow pulses where you see intense wave activity, separated by wide regions where not much is happening. This process is known as “mode locking”.

Based on these physics, a gain medium that will amplify light over a broad range of frequencies is needed to make a pulsed laser. One common such medium is titanium atoms embedded in a sapphire crystal, which will let you amplify light over a range extending from the visible spectrum across a huge band in the near infrared. With a Ti-sapphire crystal placed inside an optical cavity in between two mirrors and pumping it with a high power CW Nd-YAG laser, the non linear properties of the Ti-sapphire crystal allows to get a

“self mode-locked” laser in which the presence of a bunch of different frequencies of light leads to the generation of short pulses of light in the femtosecond range with each pulse containing a wide range of frequencies.

You can look at it in two complementary ways: one measurement you can make is to look at the overall intensity as a function of time, in which case you see a very short pulse. The other way is to look at the intensity as a function of frequency, in which case you see a wide spread of different frequencies, each with a little bit of intensity.

If you want to make a really intense ultrashort laser pulse, you quickly run into the problem of how much power an amplifier crystal can support. When the intensity of light becomes excessive, the material can be damaged, and that limits what you can do with one of these lasers.

This problem seemed insurmountable if you think of the pulse only in the intensity-versus-time domain, when the amplifier is getting all the frequencies at once. But if you look at it in intensity-versus-frequency domain, you can think that none of the individual frequencies contributing to the pulse have enough intensity to pose a problem on their own. So, the trick Gérard Mourou and Donna Strickland figured out was to separate those out, so the amplifier had to deal with only a few frequencies at a time.

There are several ways of doing this: one is with a pair of diffraction gratings to spread out the different frequencies so that some follow longer paths than others. It is also possible to stretch the pulse sending it through the length of an optical fibre, in which some frequencies of light travel faster than others. Either way, you end up with a longer laser pulse in which the high-frequency light arrives first while the lower-frequency light straggles in some time later. This is referred to as a “chirped pulse” because the chirp of a bird has the same sort of frequency structure: high frequency at the start, low at the end (or vice versa).

The chirped pulse gets you a longer duration, but more importantly, it spreads out the intensity so that it is always below the damage threshold for the amplifier. Then you can safely boost the intensity of each of the individual frequencies in the pulse, which leaves you with a more intense but longer pulse. Then you just reverse the chirping process, using another pair of diffraction gratings to make the high-frequency light on the leading edge travel a slightly longer path than the low-frequency light on the trailing edge, in such a way that all the frequencies arrive at the same time, but now with many times the intensity.

III. APPLYING THE CHIRPED PULSE AMPLIFICATION TECHNIQUE

What Gérard Mourou and Donna Strickland did was to develop a method for boosting the intensity and reducing the duration of pulses from a pulsed laser. This plays a key role in most techniques that need really high intensity light, from eye surgery to laser-based acceleration of charged particles (sometimes considered as a tool for next-generation particle

accelerators), or the need of intense fast pulses of light such as those needed in recent experiments looking at how long it takes to ionise an electron out of a molecule. This kind of enabling of other science is exactly the kind of thing that the Nobel Committee ought to recognize and support, fully justifying the choice for a prize.

III.1. Medicine: for eye surgery and vision correction

Femtosecond laser for myopia and hyperopia correction

When femtosecond laser was first developed, it did not gain tremendous notoriety until researchers determined that it could be used to cut corneal flaps as well as cutting tunnels for the implantation of intra-corneal ring segments for the treatment of keratoconus. Such field of applications needed the development of specific femtosecond sources using a hybrid Chirped-Pulse Amplification system based on erbium (Er)-doped fibres, operating at 1.6 μm [18] (Fig. 9).

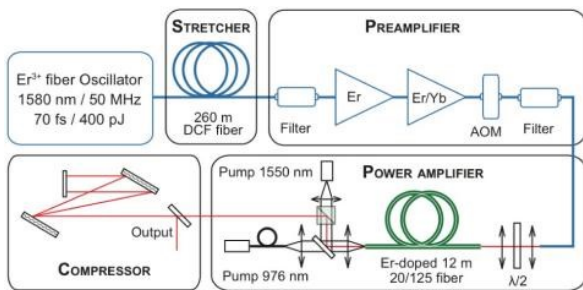


Figure 9. An example of an hybrid Chirped-Pulse Amplification system based on erbium (Er)-doped fibers, operating at 1.6 μm for applications in eye surgery and vision corrections. DCF: Dispersion-compensating fiber. AOM: Acousto-optical modulator. Yb: Ytterbium. $\lambda/2$: Half-wave plate. [18]

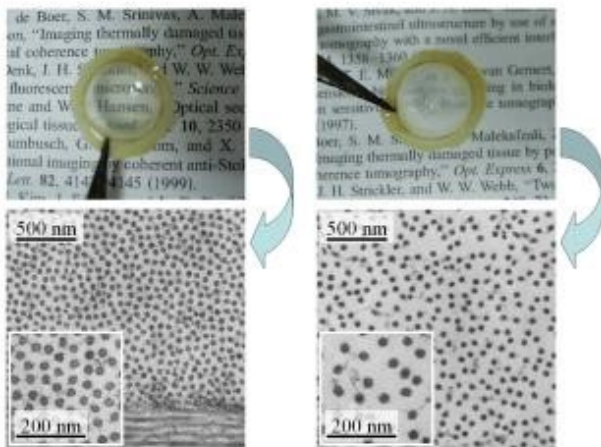


Figure 10. Fixing the cornea using lasers. **Left:** The regular arrangement of the collagen fibrils in the volume of healthy cornea is responsible for its transparency. **Right:** Most reasons for corneal grafting involve edema which perturbs the regular fibril structure and leads to strong optical scattering. [18].

Other treatments concern the corneal refractive surgery with femtosecond lasers. When compared to longer pulse width nanosecond or picosecond laser pulses, femtosecond laser-tissue interactions are characterized by significantly

smaller and more deterministic photo disruptive energy thresholds, as well as reduced shock waves and smaller cavitations bubbles. Superior dissection and surface quality results were obtained for lamellar procedures (corneal flap cutting and keratotomy). A conclusion is that femtosecond laser technology may be able to perform a variety of corneal refractive procedures with high precision, offering advantages over current mechanical and laser devices and techniques [19].

The incision quality achieved with femtosecond pulses can be analyzed by transmission electron microscopy (Fig. 11).

III.2. Laser technology: towards petawatts and attosecond pulses

Application of ultra-broadband attosecond pulses

Strickland and Mourou breakthrough with the CPA amplification scheme opened the way to the extreme limits in laser technologies for application in basics physics and intimate matter studies [21]. For instance, isolated attosecond pulses hold great potential for time-resolved measurements on unprecedented timescales which will only be realized with the development of high-energy attosecond light sources having ultrabroad bandwidths [22].

Bound-state wave-packet dynamics

The spectrum of a broadband isolated attosecond pulse can simultaneously cover bound (or quasi-bound) and continuum states of an atom or molecule, resulting in the formation of a wave packet consisting of both bound and continuum states, which naturally evolves on attosecond timescales. A delayed NIR laser can then transfer population between bound states or ionize the excited states, promoting bound electrons to the continuum. The wave-packet dynamics can be probed using attosecond electron interferometry or attosecond transient absorption spectroscopy. The full complex amplitude, including the lifetime and phase, of each excited state in the bound wave packet can be extracted. Such a measurement was recently performed in singly excited states of helium atoms, but it is applicable to more general systems as well.

Correlated electron motion

In general, attosecond transient absorption appears to be a promising tool for the application of ultra-broadband attosecond pulses for studying the electron correlation in atoms and more complex systems. Recently, attosecond transient absorption has been applied to study field-induced insulating-to-conducting state transitions in SiO₂ glass exposed to a strong laser field. Experiments revealed instantaneous and reversible field-induced modification of the insulating material, by probing changes in the transmission of the glass in the vicinity of the L-shell excitonic transition (~ 100 eV) of silicon. The results have tremendous implications for the development of light wave electronics, and indicate that transient absorption spectroscopy may allow the first access to time-resolved processes and ultrafast switching in high-T_c superconductors or semiconductor solar

cells with ultra-broadband isolated attosecond pulses that can cover the absorption edges of all the constituent atoms.

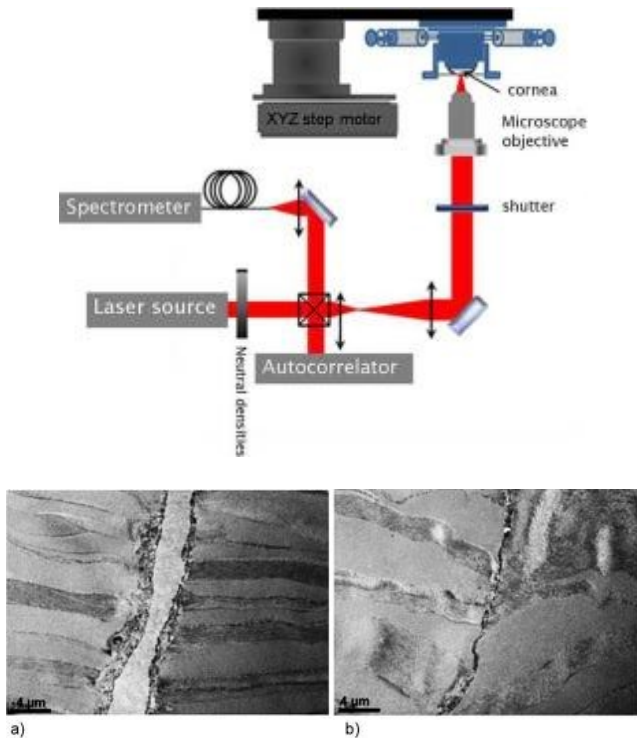


Figure 11. Laser incisions. **Top**: Experimental setup to perform incisions. **Bottom**: Typical transmission electron micrographs of incisions performed in the volume of the stroma at wavelengths of (a) 1030 nm and (b) 1650 nm. [20]

By extending such attosecond sources and spectroscopic techniques to kiloelectronvolt photon energies, the potential of attosecond technology for studying electron correlation in complex materials can be realized. Finally, combining the techniques used to generate broadband attosecond pulses with those for generating high-energy isolated attosecond pulses will allow for the generation of single-cycle pulses with gigawatt peak powers and petawatt per square centimetre peak intensities at the target, which can be applied in true attosecond pump/attosecond probe experiments.

The limits are not achieved still, and the competition continues up to zettawatt-exawatt lasers [23].

IV. SUMMARY

It is worth noticing that both the contributions of Arthur Ashkin or Gérard Mourou and Donna Strickland are very creative, technologically-oriented findings in the field of Physics. Their ideas have been rapidly applied around the globe to shed light on the foundations of laser physics, but

have also revolutionized important areas of medicine such as ophthalmology. This ability of expanding the horizons of other fields of science in exactly what the Nobel Committee ought to recognize and support, fully justifying the choice for the attributed Physics prizes in 2018.

REFERENCES

- [1] A. Ashkin, *Phys. Rev. Letters* **24**, 156 (1970)
- [2] A. Ashkin and J.M. Dziedzic, *Appl. Phys. Letters* **19**, 283 (1971)
- [3] A. Ashkin, *Phys. Rev. Lett.* **40**, 729 (1978)
- [4] S. Chu, J.E. Bjorkholm, A. Ashkin and A. Cable, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 314 (1986)
- [5] A. Ashkin, J. M. Dziedzic, J. E. Bjorkholm and S. Chu, *Optics Lett.* **11**, 288 (1986)
- [6] K. Schütze, A. Clement-Sengewald and A. Ashkin, *Fertility and sterility*, **61**, 783 (1994)
- [7] A. Farré, et al, *J. Biophoton.* **3**, 224 (2010) / DOI 10.1002/jbio.200900107
- [8] C. Bustamante, Z. Bryant and S. C. Smith, *Nature* **421**, 423 (2003)
- [9] E. A. Abbondanzieri, et al, *Nature*, **438**, 460 (2005)
- [10] C. Veigel, et al, *Nature Cell Biology* **4**, 59 (2002)
- [11] J. P. Mills, L. Qie, M. Dao, C. T. Lim and S. Suresh, *MCB* **1**, 169 (2004)
- [12] P. Galajda and P. Ormos, *Appl. Phys. Letters* **80**, 4653 (2002)
- [13] S. Maruo, A. Takaura and Y. Saito, *Optics Express* **17**, 18525 (2009)
- [14] D. Strickland and G. Mourou, *Optics Commun.* **56**, 219 (1985)
- [15] M. L. Stock and G. Mourou, *Optics Commun.* **106**, 249 (1994)
- [16] C. Orzel, from: <https://www.forbes.com/sites/chadorzel/2018/10/02/nobel-prize-in-physics-2018-how-to-make-ultra-intense-ultra-short-laser-pulses/#6c4d5886bca6>
- [17] I. Jovanovic, *Optik & Photonik*, **4**, 30 (2010)
- [18] K. Plamann, et al, *SPIE Proceedings Series*, 9 Dec. 2009, p.1 DOI: 10.1117/2.1200912.002509
- [19] T. Juhasz, et al (G. Mourou), *IEEE J. Sel. Topics in Quantum Electronics*, **5**, 902 (1999)
- [20] C. Crotti, et al, *Invest. Ophthalmol. Vis. Sci.*, **54**, 3340 (2013).
- [21] G. A. Mourou, C.P.J. Barty and M. D. Perry, *Physics Today*, **51**, 22 (1998)
- [22] M. Chini, K. Zhao and Z. Chang, *Nature Photonics* **8**, 185 (2014)
- [23] T. Tajima and G. Mourou, *Phys. Rev. Special Topics-Accelerators and Beams*, **5**, 031301 (2002)

This work is licensed under the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0, <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0>) license.



THE APPLICATION OF NUCLEAR PHYSICS IN BIOLOGY AND MEDICINE

LA APLICACIÓN DE LA FÍSICA NUCLEAR EN BIOLOGÍA Y MEDICINA

I. KORSUN[†]

Department of Physics and Teaching Methods, Ternopil Volodymyr Hnatiuk National Pedagogical University, Ukraine; korsun.igor@i.ua

[†] corresponding author

Recibido 29/3/2018; Aceptado 9/9/2018

PACS: Protons and neutrons (Protones y neutrones), 14.20.Dh.; Properties of nuclei (Propiedades del núcleo), 21.10.-k.; β decay, double β decay, electron and muon capture (Decaimiento β , doble decaimiento β , Captura de electrones y muones), 23.40.-s.

Many branches of modern science are related closely and cannot be isolated from each other. Physics is a fundamental natural science and has interdisciplinary links with many sciences. Fields such as medical physics, biochemistry, computational biology, bioengineering, physical chemistry are a valid proof of the need for interaction between sciences [1]. In this sense, the questions about the application of Physics in Biology and Medicine have been investigated by many scholars [2–6], and new discoveries in Physics have quickly found their application in Medicine [7–9].

Biology and Medicine study living organisms. According to Davidovits, “living organisms are governed by the laws of physics on all levels” [10]. In this way, the methods of physics make it possible to study the basis of life at the molecular level. As is well known, the atoms within molecules contain nuclei around which the electrons move. Nuclear physics studies the structure and transformation of atomic nuclei. Thus, it is impossible to investigate the mechanisms of biological processes at the molecular level without using the laws of nuclear physics. The aim of this article is to present and discuss the main application areas of nuclear physics in Biology and Medicine. Properties of radioactive isotopes.

The nuclei of all atoms of a particular element have the same number of protons, but often contain different number of neutrons. Nuclei that are related in this way are called isotopes [11]. All the isotopes of a certain chemical element have the same atomic number Z but different neutron number N and mass number A . Scientists identify radioactive isotopes (or radionuclides) and stable isotopes. Radioactive isotopes can be registered by using radiation detectors because they emit radioactive radiations [12]. Stable isotopes are determined by their mass using mass spectrometers [13].

Radioactive isotopes have the following properties:

1. high energy of radioactive radiation, which allows to record small doses of a radioactive substance;
2. independence of the radioactivity from external conditions;

3. identical chemical properties of stable and radioactive isotopes of the same chemical element;

4. different types of radioactive radiation (e.g., alpha radiation, beta radiation, gamma radiation) have different permeability.

Then, the properties of radioactive isotopes determine their practical application. Stable isotopes are more difficult to register than radioactive isotopes because stable isotopes do not emit radioactive radiation.

I. RADIOACTIVE TRACERS

Let N represent the number of radioactive nuclei present at time t . The rate of decay of the radioisotope may be written as

$$-\frac{dN}{dt} = \lambda N, \quad (1)$$

where λ is the decay constant of the radioactive isotope. The relationship between the decay constant λ and the half-life of radioactive isotope $T_{1/2}$ is given by formula

$$\lambda = \frac{0.693}{T_{1/2}}, \quad (2)$$

We rewrite expression 1 using formula 2 as:

$$-\frac{dN}{dt} = \frac{0.693}{T_{1/2}} N. \quad (3)$$

So, if we register 4 particles per 1 second using Geiger counter [14] then expression 3 can be rewritten as

$$4 = \frac{0.693}{T_{1/2}} N. \quad (4)$$

We can determine the number N of radioactive nuclei using expression 4:

$$N = \frac{4T_{1/2}}{0.693}. \quad (5)$$

The number N of atoms in the mass m of the substance is determined by the formula:

$$N = \frac{m}{M} N_A, \quad (6)$$

where M is the molar mass of substance, and N_A is the Avogadro constant.

The number of radioactive nuclei is equal to the number of radioactive atoms. Therefore, we can equate the corresponding parts of expressions 5 and 6, which results in:

$$\frac{0.693}{T_{1/2}} = \frac{m}{M} N_A \quad (7)$$

Using expression 7, we can determine the mass m of radioactive isotope as

$$m = \frac{4T_{1/2}M}{0.693N_A}. \quad (8)$$

According to formula 8, we may calculate the numerical values for radioactive isotopes of Carbon-14 ($T_{1/2} = 5570$ years; $m_C = 2.4 \cdot 10^{-11}$ g) and Iodine-131 ($T_{1/2} = 8.02$ days; $m_I = 8.7 \cdot 10^{-16}$ g). We note that the radioactive isotope with less half-life has less mass, which can be registered by a Geiger counter.

We can rewrite formula 1 using expressions 2 and 6 as

$$a = -\frac{dN}{dt} \frac{1}{m} = \frac{0.693}{T_{1/2}} \frac{N_A}{M} \quad (9)$$

where a is the specific activity of a radionuclide.

According to formula 9, we can determine the specific activity of Phosphorus-32 ($T_{1/2} = 14.3$ days), which is equal to $2.9 \cdot 10^5$ Ci/g. For example, the specific activity of radioactive specimen equals 0.05 Ci/g. In this case, the mass of Phosphorus-32 is equal to $1.7 \cdot 10^{-7}$ g.

As mentioned before, the chemical properties of radioactive isotopes do not differ from the chemical properties of stable isotopes of the same chemical element. Therefore, researchers add a small amount of the radionuclide to a stable isotope of this chemical element and register it by using a radiation detector. For example, a Geiger counter registers the radionuclide Phosphorus-32 of mass $1.7 \cdot 10^{-7}$ g. Thus, the radioactive radiation allows determining the transformation of the entire chemical element. Radioactive tracers have applications in many fields of science and technology.

II. SOME USES OF ISOTOPES IN BIOLOGY

In 1923, the Hungarian scientist George de Hevesy (1885-1966) first applied the radioactive isotopes in Biology [15]. He investigated the amount of lead absorbed by plants using thorium as an indicator of lead salts. All known isotopes of thorium are unstable. The most stable one, Thorium-232, has a half-life of 14.05 billion years, and its decay ends producing the stable isotope Lead-208. If plants

are burned out in different eras, the time passed from that moment can be determined by measuring the remaining thorium.

There are a number of problems in Biology that can be hardly solved without the use of isotopes. Let us present some examples.

1. A plant absorbs phosphorus from soil and fertilizers. It is necessary to determine the absorption ratio in percentage. Scientists were unable to solve this problem using analytical methods [16]. So, researchers added phosphorus fertilizers in the soil. These fertilizers contained an admixture of radioactive Phosphorus-32. After that, the researchers periodically examined the plants using a radiation detector. The intensity of radiation at different parts of the plant was determined. They determined the rate of transfer of phosphorus into the plant, distribution of phosphorus into it, etc. In this way, biologists determined the role of phosphorus in the circulation of substances in plants [17-19].

2. For a long time, scientists believed that plants absorb carbon only through leaves, and mineral salts through the roots. Experiments showed that plants assimilate carbon only under the influence of light. The use of radioactive phosphorus allowed biologists to confirm that plants feed not only through the roots, but also through the leaves [20]. Moreover, it was proved that plants are better able to absorb those substances that arrive through the leaves than those that come through the roots.

3. Radioactive tracers allowed exploring the process of photosynthesis [21,22]. Plants absorb the carbon dioxide CO_2 and water H_2O , and produce oxygen O_2 . Scientists introduced the radioisotope Carbon-14 in carbon dioxide and were able to prove that plants absorb carbon dioxide. Experiments allowed scientists to confirm that CO_2 flows from the roots into the leaves, where it participates in the photosynthesis together with CO_2 coming from the air. Water and carbon dioxide contain oxygen. Which one contains the oxygen used by the plant? Researchers placed atoms of stable isotope Oxygen-18 into water and carbon dioxide and proved that oxygen comes only from water molecules.

4. All processes in a living organism are associated with the metabolism of substances. In this case, an animal takes a certain amino acid with food. Nitrogen is labeled with a stable isotope Nitrogen-15 in that amino acid. The amount of this isotope in different organs and in the blood of the animal was measured after a while by using mass spectrometer. This method also allows researchers to measure the time of appearance of the chemical element in different organs and its speed of movement. Radioactive tracers allow biologists to investigate the distribution of various chemical elements in different organs [23].

III. AUTORADIOGRAPHY METHOD

In 1896, the French physicist Antoine Henri Becquerel (1852-1908) discovered the effect of radioactive radiation on a photographic plate [24]. Scientists [25-27] often apply the

so-called autoradiography method with radioactive tracers. The radioactive radiation of an isotope indicator acts on the photographic film or emulsion because the photographic film or emulsion is opposed to the labeled tissue section. The distribution of blackening on the film or emulsion demonstrates the distribution of a given chemical element in an object. This created image is called an autoradiogram.

According to Barthe et al., "the scintillation gas detector is an imaging device of interest to many researchers, especially those studying the radiopharmacology" [28]. Now, the autoradiogram is available as a digital image (digital autoradiography) due to the development of scintillation gas detectors. Scientists apply this method in Medicine, Biology, Chemistry, Geology, and many other fields of science and technology. For example, the use of the autoradiography method in Biology helps to investigate the distribution of phosphorus inside a plant [29] because lighter places on the resulting photograph indicate a higher amount of radioactive phosphorus. The autoradiography method was applied successfully for the study of virus particles and nucleic acids [30].

IV. RADIOISOTOPES IN MEDICINE

In the first place, scientists research metabolism and circulation of substances in the human body using radioactive tracers [31]. Radioisotopes in acceptable amounts are introduced into the human body with food. For example, a small amount of radioactive Sodium-24 is added in the blood. Sodium-24 is a source of gamma radiation. This radiation easily passes through the tissues of the body; therefore it is detected by detectors. The volume of blood in the human body can be determined by this method. The average adult has about 4.5 to 5.5 liters of blood circulating inside body [32]. The introduction of radionuclide Sulfur-35 in medications allows determining their ways of movement, place of accumulation, and the rate of excretion from the body. The use of radioactive tracers has made it possible to investigate the process of transforming sugar in the human body. Moreover, radioisotopes can be introduced into separate molecules [33].

In the second place, radioactive tracers are used for medical diagnosis [34]. Certain chemical elements accumulate in certain body organs. For example, phosphorus is accumulated in the bones, and radioactive Phosphorus-32 in a diseased tissue concentrates 10-100 times more than in a healthy tissue. Sargis said that "the function of the thyroid gland is to take iodine, found in many foods, and convert it into thyroid hormones: thyroxine (T4) and triiodothyronine (T3)" [35]. Therefore, radioactive Iodine-131 is used for diagnosis of disease of the thyroid gland because thyroid gland accumulates iodine. Doctors determine the speed of accumulation of iodine in the thyroid gland.

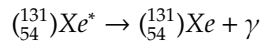
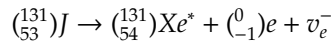
V. RADIATION THERAPY

High-energy radiation kills cancer cells. Therefore, doctors apply gamma rays, X-rays, and charged particles for

radiation therapy. Gamma-rays are used for killing cancerous cells in external beam radiotherapy because this radiation destroys cancer cells faster than healthy ones. While Radium seems the natural source of gamma-rays, it is expensive, so Cobalt-60 is often used [36]. The therapeutic installation of Cobalt-60 with radioactivity of 400 Ci replaces 400 g of radium. It is important to underline that Cobalt-60 constitutes a monochromatic gamma radiation.

Internal radiation therapy allows a higher dose of radiation in a smaller area than might be possible with external beam radiotherapy. The isotopes Phosphorus-32, Iodine-131, Gold-198, and others are used for internal radiation therapy. In this case, patients take one of these substances inside. Radioactive isotopes concentrate in the corresponding tissues of the body; they decay and operate on the desired fabric by radiation.

For example, isotopes Iodine-131 concentrate in the thyroid gland and emit beta radiation. We can write the equations of β^- decay in this case as



Notice that the second term at the right hand of the upper equation is an electron (beta particle) and the last one is an anti-neutrino; the last term in the lower equation is gamma radiation. Beta particles act on fabric of the thyroid gland. As a rule, alpha decay and beta decay include the emission of gamma-rays, which have higher energy than other electromagnetic waves. Therefore, gamma radiation is potentially harmful for the human body.

Scientists developed a method of treatment of cancer by proton beams, which called as proton therapy [37, 38]. Protons do not dissipate in the tissues of the body and stop in the cancer cells. In this way, the proton beams damage the adjacent tissues in a small extent.

VI. WHAT IS THE MOST APPROPRIATE RADIONUCLIDE?

It is necessary to observe the safety rules when working with radioactive isotopes. The application of radioisotopes within practice involves a discussion question about regarding the risk/benefit ratio. As a rule, the radioisotopes which have the half-life in 10 times greater than the duration of the experiment are used in practice. Different radioactive isotopes have different half-lives. Which of radioactive isotopes is safest for using in radioactive tracers?

Many radioactive isotopes are the sources of beta radiation (VI).

Table 1. Some radionuclides are used as radioactive tracers

Radionuclide	Nuclear reaction	Half-life	Type of radiation
Carbon-11	$(^{10}_5B(d,n)(^{11}_6C)$	20.4 minutes	$(^0_{+1}e)$
Carbon-14	$(^{14}_7N(n,p)(^{14}_6C)$	5570 years	$(^0_{-1}e)$
Sodium-24	$(^{23}_{11}Na(n,\gamma)(^{24}_{11}Na)$	15 hour	$(^0_{-1}e, \gamma)$
Phosphorus-32	$(^{32}_{16}S(n,p)(^{32}_{15}P)$	14.3 days	$(^0_{-1}e)$
Sulfur-35	$(^{35}_{17}Cl(n,p)(^{35}_{16}S)$	87.5 days	$(^0_{-1}e)$
Cobalt-60	$(^{59}_{27}Co(n,\gamma)(^{60}_{27}Co)$	5.3 years	$(^0_{-1}e, \gamma)$

Sargent [39] has researched the maximum energy of beta particles. Sargent's law can be written as

$$\lambda = kE_m^5 \quad (10)$$

where λ is the decay constant, E_m is the maximum energy of beta particles, and k is a characteristic constant.

The decay constant is given by

$$\lambda = \ln \frac{2}{T_{1/2}} \quad (11)$$

We can rewrite Sargent's law using formula 12:

$$\frac{\ln 2}{T_{1/2}} = kE_m^5 \quad (12)$$

Expression ?? demonstrates that particles of radioactive isotopes with a longer half-life $T_{1/2}$ have less maximum kinetic energy E_m . It is clear that particles with low energy cause less harm to human health. For example, beta particles of Carbon-14 have low energy because a half-life of this radioactive isotope is equal to 5570 years.

VII. CONCLUSIONS

In summary, it has been presented here a number of applications of isotopes in Biology and Medicine. The application of isotopes in Biology made it possible to investigate the mechanism of photosynthesis; to determine the best conditions for fertilizer application; to establish the best ways for plant nutrition; to prove the efficiency of plant nutrition through the leaves and to study the distribution of various chemical elements in different organs of animals. In the field of Medicine, the methods of nuclear physics are used for diagnosis, therapy, research of circulation of substances and medication, as well as for sterilization of medical instruments.

The author of this article is thankful to anonymous reviewers and Editor G. Rojas-Lorenzo for useful comments.

REFERENCES

[1] L. Marcu, The Annals of Oradea University, Biology Fascicle XIV, 53 (2007).

- [2] E. M. McMillan, Oral Surgery, Oral Medicine, Oral Pathology **1**, 355 (1948).
- [3] T. R. Mackie, Phys. Med. Biol. **51**, R427 (2006).
- [4] J. Newman, Physics of the Life Sciences (Springer, 2008), pp. 633-658.
- [5] M. A. Chaudhri, and M. S. Chaudhri, in Proceedings of the 7th Conference on Nuclear and Particle Physics (Sharm El-Sheikh, 2009), pp. 25-33.
- [6] O. Karaman, A. G. Tanir, and M. H. Bölükdemir, Turk. J. Phys. **39**(1), 31 (2015) doi: 10.3906/z-1401-15
- [7] E. Carrillo, A. Jiménez, A. Moreno, L. Leija, A. Vera, and A. Ramos, Rev. Cubana Fis. **33**, 83 (2016).
- [8] N. López-Marín, F. Corrales-Machín, E. Castro-Álvarez, and R. Rodríguez-Fernández, Rev. Cubana Fis. **33**, 122 (2016).
- [9] A. González Arias, and F. A. Horta-Rangel, Rev. Cubana Fis. **34**, 70 (2017).
- [10] P. Davidovits, Physics in Biology and Medicine, 3rd ed. (Academic Press, 2008).
- [11] R. A. Serway, C. J. Moses, and C. A. Moyer, Modern Physics, 3rd ed. (Thomson, 2005).
- [12] S. Glasstone and S. J. Tomas, Atomic energy and your world (Atomic Energy Commission, 1970).
- [13] S. William, Review of Scientific Instruments **18**(8), 540 (1947).
- [14] S. Glasstone, Sourcebook atomic energy, 2d ed. (D. Van Nostrand Company, 1958).
- [15] H. Levi, Eur. J. Nucl. Med. **1**, 3 (1976) doi: 10.1007/BF00253259
- [16] J. G. Hamilton, J. of Appl. Phys. **12**, 440 (1941).
- [17] G. V. Heresy, Nuovo Cim **15**(5), 279 (1938).
- [18] P. R. Stout, and D. R. Hoagland, Am. J. Bot. **26**, 320 (1939).
- [19] C. L. Comar, and J. R. Neller, Plant Physiology **22**(2), 174 (1947).
- [20] S. M. Alam, Pak. J. Bot. **14**, 99 (1982).
- [21] S. Ruben, W. Z. Hassid, and M. D. Kamen, J. Am. Chem. Soc. **61**(3), 661 (1939).
- [22] M. Calvin, and P. Massini, Experientia VIII, 445 (1952).
- [23] H. DeWayne Ashmead, Amino Acid Chelation in Human and Animal Nutrition (CRC Press, 2012).
- [24] H. Becquerel, Comptes Rendus Hebdomadaires des Séances de l'Académie des Sciences de Paris **122**, 420 (1896).
- [25] G. A. Boyd, Autoradiography in Biology and Medicine (Academic Press, 1955).
- [26] N. Holland, D. Holland, T. Helentjaris, K. S. Dhugga, B. Xoconostle-Cazares, and D. P. Delmer, Plant Physiol. **123**, 1313 (2000).
- [27] N. T. Khan, J. Biom. Biostat. **8**, 361 (2017).
- [28] N. Barthe, P. Coulon, C. Hennion, D. Ducassou, B. Basse-Cathalinat, and G. Charpak, The Journal of Nuclear Medicine **40**(5), 868 (1999).
- [29] S. Kanno, Y. Kurita, M. Ohnishi, and T. Mimura, Bio-protocol **4**(13), e1175 (2014).
- [30] M. Raje, and G. C. Mishra, Encyclopedia of Immunology, 2nd ed. (Academic Press, 1998), pp. 296-300.

- [31] G. T. Seaborg, Ch. J. T. Ramey, G. F. Tape, and W. E. Johnson, *Radioisotopes in Medicine* (U.S. Atomic Energy Commission, 1967).
- [32] L. Geggel, How Much Blood Is in the Human Body? (March 3, 2016) (<https://www.live-science.com/32213-how-much-blood-is-in-the-human-body.html>).
- [33] S. F. Howell, J. D. Thayer, and L. W. Labaw, *Science*, **107**, 299 (1948).
- [34] F. E. Kelsey, *JAMA* **146**(12), 1131 (1951).
- [35] R. M. Sargis, How Your Thyroid Works (March 23, 2015) (<https://www.endocrineweb.com/conditions/thyroid/how-your-thyroid-works>).
- [36] S. A. Memon, A. A. Cheema, N. A. Laghari, and F. H. Mangi, *J. Ayub. Med. Coll. Abbottabad* **26**, 279 (2014).
- [37] W. P. Levin, H. Kooy, J. S. Loeffler, and T. F. DeLaney, *British Journal of Cancer* **93**, 849 (2005).
- [38] H. Liu, and J. Y. Chang, *Chinese Journal of Cancer* **30**, 315 (2011).
- [39] B. W. Sargent, *Proceedings of the Royal Society A* **139**, 659 (1933).

This work is licensed under the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0, <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0>) license.



ADIÓS A LAS CELEBRACIONES POR EL CUADREGÉSIMO ANIVERSARIO DE LA SOCIEDAD CUBANA DE FÍSICA



Review Article | Published: 29 August 2018

Subwavelength integrated photonics

Pavel Cheben , Robert Halir, Jens H. Schmid, Harry A. Atwater & David R. Smith

Nature 560, 565–572 (2018) | [Download Citation](#) 

El pasado jueves 1 de noviembre se realizó la actividad de clausura de las celebraciones por el 40 aniversario de la fundación de la

Sociedad Cubana de Física (SCF). El acto, que tuvo lugar en el aula de postgrado del edificio de Física en la Universidad de La Habana, comenzó con la entrega, por parte de la presidenta de la SCF María Sánchez-Colina, de un diploma de reconocimiento al Dr. Pavel Cheben por su larga colaboración con físicos cubanos, especialmente del CEADEN. El Dr. Cheben, del National Research Council de Canadá, es una personalidad de vanguardia en el campo de los materiales fotónicos. Una vez concluida la entrega del reconocimiento, el Dr. Cheben ofreció la conferencia “Metamaterial integrated photonics”, basada en un reciente artículo de su autoría aparecido en la prestigiosa revista “Nature”.

E. Altshuler

LA ENERGÍA FOTOVOLTAICA ADQUIERE MOMENTUM

La fotovoltaica vivió una gran jornada el pasado 28 de Septiembre del 2018 con la re-apertura del antiguo Laboratorio de Celdas Solares del Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE) - Facultad de Física (FF), ahora devenido Laboratorio de Investigaciones Fotovoltaicas. Localizado en su tradicional espacio llamado “la casita”, en la parte posterior sur de los bajos de la Facultad de Física ha recibido una estratégica ampliación de

sus espacios y una inyección de equipamiento proveniente del Ministerio de Energías y Minas. Estos extraordinarios avances han ocurrido en el contexto de un proyecto presentado con la iniciativa de la Vice-Rectora de Investigaciones de la Universidad de la Habana Dra. Vilma Hidalgo de los Santos y el grupo de investigación de este tema ante el entonces Ministro de Energías y Minas Alfredo López, en Marzo del 2014.



Momento del acto celebrado en pasado 28 de septiembre en que la doctora Nancy Martínez, directora del IMRE, lee las palabras de apertura. En la presidencia, desde el punto más cercano al más lejano, se pueden identificar el Dr. Daniel Stolik, la Ing. Norbelis Infante Pérez (Directora de Capacitación de la Unión Eléctrica), el Ing. Rosell Guerra Campaña (Director de Energías Renovables del MINEM), el Dr. Gustavo Cobreiro (Rector de la Universidad de La Habana) y la Dra. Aurora Fernández González (Viceministra del MES). Al centro de la primera fila de frente a la presidencia, se encuentra la Dra. Lídice Vaillant y, a su izquierda, la Dra. Vilma Hidalgo (Vicerrectora de Investigaciones de la Universidad de La Habana, UH), la Dra. Ania Hernández (Directora de Ciencia y Técnica de la Universidad de La Habana) y el Ing. Alberto Agraz (Director de la OTRI, Universidad de La Habana). Foto: E. Altshuler

Con el espaldarazo del Ing. Alfredo López, actual Ministro de Industrias, se priorizó por la dirección universitaria el espacio del Laboratorio dentro de las obras de restauración de la Facultad de Física y comenzó un arduo proceso de adquisición de un grupo de equipos de elevadas prestaciones para la realización de inspecciones y evaluaciones en los parques fotovoltaicos del país. Este Laboratorio se convierte de este modo en un excelente ejemplo de interacción Universidad - Empresa, demostrando que es posible lograr una sinergia entre la industria cubana y los espacios universitarios donde las capacidades estén creadas. Debe destacarse en ese sentido la gran visión del MINEM y su anterior ministro Alfredo López, a quien este grupo de investigadores y la Universidad de la Habana agradecerá siempre su visión de futuro.

El Laboratorio de Investigaciones Fotovoltaicas posee una larga tradición en la investigación básica y en la cooperación con la industria. En sus instalaciones se fabricó la primera celda solar cubana de laboratorio, específicamente de silicio y se mantuvo la investigación de modo sostenido desde los años 70. Desde este grupo de trabajo se han formado decenas de doctores en ciencias físicas y se han desarrollado investigaciones relacionadas con materiales para diversas tecnologías de celdas solares, desde el silicio, pasando por las películas delgadas y llegando a las nanoestructuras. En la interacción con el sector productivo se han obtenido importantes logros como la gestación del programa nacional fotovoltaico, la entrega de la carta tecnológica para la fabricación de celdas solares a nivel industrial y más recientemente, el acuerdo para la inspección y evaluación de parques fotovoltaicos. Una de las grandes ventajas

de este Laboratorio es su amplia visión de trabajo dentro de la fotovoltaica, nutriendo las aplicaciones en el mundo real con la investigación básica acumulada a lo largo de varios años de trabajo.

Así mismo, el laboratorio posee una importante labor de formación con impacto en el pre y posgrado, y que se extiende al personal externo tanto empresarial como técnico industrial con el Diplomado Fotovoltaico. Esta labor de formación comenzará a realizarse a partir de ahora dentro del Aula Solar, localizado en los altos de “la casita”, donde se encuentra este espacio que se destinará a enseñar con el apoyo de proyectos demostrativos, incluyendo la realización de extensión universitaria. Se efectúa también desde este grupo una importantísima labor de vigilancia tecnológica desde su Consultoría Fotovoltaica, presidida por el Dr. Daniel Stolik lo que lleva a la publicación de incontables informes y a la producción del blog de fotovoltaica (<http://www.imre.uh.cu/vtfotovoltaica/>). El laboratorio fue también el creador de la serie de conferencias internacionales CUBAFOTOVOLTAICA, un espacio académico de interacción sobre la fotovoltaica en Cuba que funge como punto de encuentro, discusión y formación para investigadores, decisores, personal técnico y empresas de Cuba y del mundo.

¡Felicidades a la fotovoltaica de la Universidad de la Habana y de Cuba!

Dra. L. Vaillant-Roca

IMRE, Universidad de La Habana

LA OLUF ROMPE RECORD DE PARTICIPACIÓN



Acto de premiación de la OLUF'2018 en el Paraninfo de la Academia de Ciencias de Cuba, el jueves 20 de septiembre de 2018. De izquierda a derecha: Oscar Álvarez Pomares; Coordinador del Proyecto “Academia de Puertas Abiertas”, Ernesto Altshuler Álvarez, Joan Andrés Nieves Cuadrado, Carlos Ernesto Lopetegui González, Michel Romero Rodríguez, María Sánchez Colina (Presidenta de la SCF), Martín Ávila González, Marcos Espinosa Cuartas, Arbelio Pentón Madrigal (Decano de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana) y José Alejandro Rubiera Gimeno. En primer plano a la izquierda, banco de capacitores que se usó en la conferencia “James Clerk Maxwell y el Fin de la Física”, que se dictó una vez terminado el acto. Foto: G. Viera.

El en el mes de mayo de 2018 se realizó la 2da Olimpiada Latinoamericana y del Caribe de Física universitaria (OLUF). La Olimpiada es organizada por la Sociedad Cubana de Física y la Facultad de Física de la Universidad de la Habana y este año contó con el auspicio de la UNESCO, el Centro Latinoamericano de Física (CLAF), la Academia de Ciencias de Cuba (ACC), La Federación Iberoamericana de Sociedades de Física (FELASOFI) y el South American Institute for Fundamental Research de Brasil (asociado al ICTP).

En la competencia participaron 197 estudiantes de 39 universidades de Argentina, Belice, Brasil, Colombia, Costa Rica, Cuba, El Salvador, Guatemala, México y Venezuela. De Cuba resultaron premiados Michel Romero Rodríguez con medalla de oro, Carlos Ernesto Lopetegui González, Samuel Martínez Alcalá

y Marcos Espinosa Cuartas con medallas de Bronce; todos de la Facultad de Física de la Universidad de la Habana. También obtuvo medalla de bronce Alejandro Lázaro Alfonso Yero de 5to año de Ingeniería Automática en la Universidad Central de Las Villas. Obtuvieron mención los estudiantes José Alejandro Rubiera Gimeno, del Instituto Superior de Tecnología y Ciencias Aplicadas de la Universidad de La Habana (INSTEC) y Joan Andrés Nieves Cuadrado, de la Facultad de Física de la Universidad de la Habana. La premiación se realizó en el paraninfo de la Academia de Ciencias de Cuba el 20 de septiembre de 2018, donde el profesor Ernesto Altshuler dictó la conferencia “James Clerk Maxwell y el fin de la Física”.

María Sánchez-Colina

Presidenta, SCF

GERARDO DELGADO BARRIO

(9 de abril de 1946 - 26 de julio de 2018)



Gerardo Delgado Barrio (1946-2018).

El Profesor Delgado Barrio dio sus primeros pasos en la ciencia con la realización de su tesis doctoral bajo la supervisión del Profesor Yves Smeyers Guillemín en 1973. La misma estuvo dedicada al modelo "Half Projected Hartree-Fock (HPHF)". Desde entonces hasta su deceso desarrolló una extraordinaria carrera científica. Entre las diversas líneas de trabajo científico en que participó pueden destacarse las siguientes: Estudios sobre los movimientos nucleares, colisiones y semi-colisiones, así como estudios de la estructura y dinámica de complejos triatómicos de van der Waals. Esta línea de investigación que siguió durante varios años, permitió estudiar la Predisociación Vibracional (VP) de varios agregados moleculares.

Debe destacarse que en colaboración con el grupo francés de la Universidad de Orsay (París), fueron los primeros en realizar cálculos tridimensionales "exactos" de ecuaciones acopladas y en la aplicación de paquetes de ondas para estudiar la VP de sistemas triatómicos. Estudió sistemas líquidos; investigó los niveles vibro-rotacionales de la molécula de agua con el empleo de diversas coordenadas y aproximaciones. Realizó investigaciones sobre la estructura y dinámica de varios trímeros, encontrando estados Efimov en trímeros de He. Igualmente, realizó estudios de agregados iónicos del Hidrógeno, H_3^+ , H_5^+ , H_7^+ . Fue promotor de la colaboración científica internacional, participando en múltiples intercambios y proyectos internacionales en Europa, Estados Unidos y América Latina.

Sus investigaciones han tenido tal impacto y relevancia que continuamente se estudia la correspondencia entre los trabajos teóricos desarrollados por el grupo que dirigió, y los experimentos realizados por prestigiosos grupos experimentales.

Los primeros contactos con los físicos y químicos cubanos los estableció en el año 1990, cuando visitó a Cuba por primera vez, y participa en un encuentro de Química Computacional y Diseño Molecular organizado por la Facultad de Química de la Universidad de La Habana. Vuelve a Cuba en 1991, en esta ocasión para impartir un curso en el Instituto Superior Pedagógico "Enrique José Varona" e inicia una colaboración de trabajo científico en el campo de la física química molecular teórica con profesionales cubanos. Desde 1997 es el responsable del equipo español del Proyecto de colaboración conjunta entre el CITMA y el CSIC, que se dedicó al estudio de la dinámica de moléculas simples con interés para el Medio Ambiente. Como parte del intercambio científico, volvió a Cuba en repetidas ocasiones, fue invitado a congresos y profesor de escuelas organizadas para estudiantes de maestría y doctorado. Desde aquellos días de 1990 hasta la actualidad, han transcurrido 28 fructíferos años de trabajo conjunto, y se han desarrollado fuertes lazos entre profesionales cubanos de varias instituciones de nuestro país con investigadores del grupo que él dirigió. En el grupo que lideró realizaron el doctorado 4 cubanos e igualmente otros tanto han desarrollado estancias posdoctorales. Durante todos estos años de cooperación con Cuba, fue un importante divulgador de la actividad científica y profesional cubana.

El Profesor Delgado Barrio, fue presidente de la Real Sociedad Española de Física, Presidente de la Federación Iberoamericana de Sociedades de Física (FEIASOFI), Primer Presidente del grupo especializado de Física Atómica y Molecular de España, representante español en la División de Ciencia y Sociedad de la European Physical Society (EPS), Editor del libro: *Dynamical Processes in Molecular Physics*, co-editor de varios números especiales de revistas reconocidas en el campo de la Física-Química, Organizador de los Congresos Ibéricos de Física Atómica y Molecular, Organizador de la Décima Conferencia Europea de Dinámica y colisiones moleculares (X MOLEC), Presidente de la sección de Química - Física de la División de Física Atómica y Molecular de la European Physical Society (EPS), vicedirector y director del Instituto de Matemáticas y Física Fundamental del Consejo Superior de Investigaciones Científicas. Al momento de su deceso era miembro de mérito de la Sociedad Cubana de Física y del equipo editorial de la revista cubana de Física. Por su destacada contribución a la ciencia iberoamericana y en la formación y desarrollo de profesionales cubanos, especialmente del InSTEC, mereció el reconocimiento de Doctor Honoris Causa del Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC). En

cada una de las responsabilidades que desempeñó, estuvo presente una vocación integracionista entre los científicos iberoamericanos. De igual modo, siempre demostró una devoción por el desarrollo científico de Iberoamérica, lo que se evidencia en sus múltiples visitas de trabajo y acciones que realizó en la mayoría de nuestros países.

Desafortunadamente, nuestro profesor Gerardo falleció el pasado 26 de julio luego de batallar durante años con la enfermedad que lo arrancó de la vida y la profesión. Los que tuvimos el privilegio de trabajar y compartir con él sus enseñanzas, lamentamos profundamente su pérdida física,

pero nos seguirá acompañando siempre como el destacado científico que fue y el hombre de excelentes cualidades humanas.

La Revista Cubana de Física lamenta profundamente haber perdido a uno de los más prestigiosos miembros de su Comité Editorial.

J. Rubayo Soneira
Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas
(InSTEC),
Universidad de La Habana

LEON LEDERMAN

(July 15, 1922 – October 3, 2018)

During a visit to the Physics Faculty (University of Havana) in 1999, Leon Lederman talks to undergrad students.

Perhaps there is no better way to describe professor Leon Lederman than the words of his wife, Ellen Carr Lederman, shortly after his death: “What he really loved was people, trying to educate them and help them understand what they were doing in science”. Out of love for people, he visited Cuba in 1999 and 2003 –perhaps devoting more time to talk to students than to experienced colleagues. In the first occasion he visited the Physics Faculty, University of Havana,

as well as the “V. I. Lenin” high school for science-oriented students. In 2003, he participated in the “VIII Inter-American Conference on Physics Education”, celebrated in Havana. He said in an interview offered in Havana: “During my many trips by these lands [Latin America] I use to ask why they don’t make a big Latin American Lab where all their countries collaborate, because that may build up enough critical mass to become one of the best labs in the world. In the same way, I also propose a Caribbean Laboratory that would study problems like disaster mitigation”.

Lederman made great contributions to our understanding of the fundamental forces and particles, especially by the discovery of the muon-neutrino, for which he shared the Physics Nobel prize in 1988. He also coined the word “God’s particle” for the Higgs boson in 1993, when it was just a theoretical idea.

What professor Lederman would have never suspected is that his Nobel Prize medal would be sold to help pay his mounting medical bills. He had begun to suffer from memory loss in 2011, and finally died from dementia. Fortunately, people like him will always be in our –much less volatile– collective memory. Cuban physicists will never forget his wit and warmth.

E. Altshuler

ROLANDO SILVANO DURÁN ALFONSO

(30 de agosto de 1948 – 28 de septiembre de 2018)



Rolando Silvano Durán Alfonso (1948-2018).

El 28 de septiembre de 2018 falleció en La Habana, a causa de una isquemia cerebral, el Dr. en Ciencias Físicas Rolando Durán Alfonso. Había nacido en Encrucijada, antigua provincia de Las Villas, el 30 de agosto de 1948. Cursó la segunda enseñanza en la ESB "Pedro Lantigua" del Cerro y en el IPU "Saúl Delgado" del Vedado y, de 1966 a 1970 estudió la carrera de Licenciatura en Física en la Universidad de La Habana, donde obtuvo muy buenos resultados docentes, se destacó como atleta de alto rendimiento y trabajó como alumno ayudante de Álgebra Lineal.

En 1971 comienza a trabajar como investigador en el área de Teoría del Núcleo en el Instituto de Física Nuclear (IFN), con sede en Managua. En 1974 culmina la maestría en Física Nuclear con la tesis "Cálculo de la Parte Imaginaria del Potencial Óptico en la DWBA en núcleos esféricos y publica el artículo "Calculation of the Imaginary Part of the Optical Potential in DWBA in C_{12} and Ca_{40} " (Rev. ACC, 1975). Durante el curso 1972-1973 fue Instructor y a partir de 1973, Profesor Adjunto en la Facultad de Física de la Universidad de La Habana. De 1976 a 1979 trabajó en el Departamento de Teoría del Núcleo Atómico del Laboratorio de Física Teórica del Instituto Unificado de Investigaciones Nucleares, Dubná, URSS, donde publicó el trabajo "Fragmentation of One-Nucleon States in Ytterbium Isotopes" (Comm. JINR, 1978).

De regreso en Cuba, trabaja como profesor de Física en el Instituto Preuniversitario de Marianao "Manolito Aguiar" (1981-1985) y en el Instituto Superior Politécnico "José Antonio Echevarría" (1985-1990).

En los Estados Unidos trabajó a partir de 1991 como profesor

en el nivel medio y, desde 1993, en el Departamento de Física de la Universidad Internacional de la Florida (UIF) como Ingeniero Técnico Superior. Además de la Física General, enseñaba Astronomía Descriptiva. En esos años retoma su trabajo de investigación lo que resultó en una maestría en ingeniería en 1998 ("Giga and Tera-Hertz Noise Under an Applied Bias in Mesoscopic and Ballistic Nanometer Degenerate Structures") y el doctorado en el 2002 ("Noise in gallium nitride-based quantum well structures used for nanometer devices in the frequency range 1 Hz-3 MHz and temperature range 77K - 324K") en el FAST Center de la misma universidad, manteniendo su trabajo como docente en el Departamento de Física. Sus investigaciones tienen que ver con el ruido electrónico de dispositivos mesoscópicos; tema sobre el que publica¹ y participa en varios congresos.

Resaltan en todos los aspectos de la vida de Rolando su originalidad, versatilidad e independencia. Así, todavía como estudiante de preuniversitario participa como aficionado en el rastreo de satélites que se efectuó desde la azotea del Capitolio, dirigido por el Departamento de Astronomía de la ACC. En una práctica de tiro como estudiante en la Universidad de La Habana fue descubierto como tirador certero, llegando, en menos de un año, a ganar el campeonato nacional en la modalidad de match inglés, con record nacional de 576 puntos, y como parte del equipo nacional de tiro, participar en una competencia internacional en la antigua República Democrática Alemana. Sin embargo, decidió no continuar su carrera deportiva, para dedicarse a la carrera científica. Al terminar la licenciatura, trabajó por iniciativa propia durante varios meses en un grupo de profesores de preuniversitario y tecnológico para el estudio y aplicación del curso de Física de nivel medio del Physical Science Study Committee (PSSC), actividad que culmina con un curso de superación para profesores de Institutos Tecnológicos organizado por el Ministerio de Educación en 1971, a instancias del grupo. En sus años de trabajo en el IFN, cuando había apagón, tomaba la ruta 63, se sentaba en un asiento que tuviese algo de luz para estudiar y hacía el viaje las veces que fuese necesario, hasta que pasaba por la zona y veía que ya había electricidad. Después de regresar de la URSS, además de sus actividades docentes, practicó el ciclismo y participó en competencias nacionales, incluida una vuelta a Cuba, ya con 39 años de edad. También aprendió prácticamente sólo a tocar guitarra y llegó a formar parte de un conjunto musical. Le entusiasmaba buscar las explicaciones físicas de hechos cotidianos, y disfrutaba mucho discutir sobre esto. En su forma de enfocar la Física y en particular la enseñanza, se identificaba con el estilo del célebre Richard Feynman. En ocasiones resultaba un interlocutor difícil que, independientemente del tema de la plática, obligaba a su interlocutor a expresarse con rigor,

¹Comment on the measurement of bandgap narrowing from the minority-carrier current in heavily doped emitters (*Physica Status solidi* (a), 1993); Generation-recombination noise in gallium nitride-based quantum well structures (*J. Appl. Phys.*, 2003)

profundidad y precisión. Mantuvo una relación muy cercana con sus padres, su hermano y sus hijos.

Desde los Estados Unidos viajaba con mucha frecuencia a La Habana, donde decía sentirse mejor. Participó en varias ocasiones en el maratón Marabana. La necesidad de vivir en su país fue creciendo en él hasta que, en 2015, se estableció definitivamente en Cuba. Su deseo de volver a trabajar como profesor de Física en las universidades cubanas se vio frustrado por los problemas de salud que finalmente le

condujeron a la muerte.

Los que lo conocimos y apreciamos, lo recordaremos siempre por su inteligencia y singularidad. El autor agradece la colaboración brindada para la escritura de este obituario a E. del Pozo, F. González, R. Orosco, C. Rodríguez, R. Guerra y M. Blanco

C. Díaz-Águila
Centro de Biomateriales,
Universidad de La Habana

