

## UN PROBLEMA DIFÍCIL DE OPTIMIZACIÓN COMBINATORIA



**EDITOR**

E. ALTSHULER

Facultad de Física, Universidad de la Habana  
ealtschuler@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

University Erlangen-Nuremberg  
osbel.almora@fau.de

D. MIRAVET

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

**EDITORES ASOCIADOS**

A. J. BATISTA-LEYVA, G. ROJAS-LORENZO

INSTECH, La Habana  
abatista@instec.cu, german@instec.cu

W. BIETENHOLZ

UNAM, México  
wolbi@nucleares.unam.mx

J. O. FOSSUM

NTNU, Noruega  
Jon.fossum@ntnu.no

L. H. GREENE

National Magnetic Lab, U.S.A  
lhgreene@magnet.fsu.edu

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  
e.ramirez@hifibio.com

T. SHINBROT

Rutgers University  
shinbrot@soemail.rutgers.edu

C. A. ZEN-VASCONCELOS

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

**COORDENADAS**

- 2 **TO TEACH OR NOT TO TEACH, THAT IS THE QUESTION:**  
[ENSEÑANDO FÍSICA EN TIEMPOS DE COVID-19]  
E. Altshuler

**ARTÍCULOS ORIGINALES**

- 4 **STUDY BY RAMAN SPECTROSCOPY OF THE INDUCED RADIATION DAMAGE IN GaAs:Cr EXPOSED TO 20 MeV ELECTRON BEAM**  
[ESTUDIO MEDIANTE LA ESPECTROSCOPIA RAMAN DEL DAÑO RADIAL INDUCIDO EN EL GaAs:Cr AL EXPONERSE A UN HAZ DE ELECTRÓNOS DE 20 MeV]  
A. Leyva-Fabelo, D. Leyva-Pernía, J. A. Rubiera-Gimeno, C. M. Cruz Inclán, J. L. Valdés-Albuernes, V. Kobets, A. Abou El-Azm, U. Kruchonak, A. Zhemchug, G. Shelkov, A. Pérez-Rodríguez, M. Mayeta-Aguilera
- 10 **QUANTITATIVE SURFACE MORPHOLOGY ANALYSIS USING ROUGHNESS PARAMETERS**  
[ANÁLISIS CUANTITATIVO DE LA MORFOLOGÍA SUPERFICIAL USANDO LOS PARÁMETROS DE RUGOSIDAD]  
M. P. Hernández, G. Hernández
- 17 **ENSEÑANZA DE MÉTODOS NUMÉRICOS A TRAVÉS DE UNA HERRAMIENTA DIDÁCTICA BASADA EN ARDUINO: EL MECANISMO DE LAS 4 BARRAS REVISITADO**  
[TEACHING NUMERICAL METHODS THROUGH A DIDACTIC ARDUINO-BASED TOOL: THE 4-BAR LINKAGE CASE REVISITED]  
E. Serrano-Pérez
- 20 **ALTERNATIVE METHOD FOR THE PHYSICAL INTERPRETATION OF THE NUT SOLUTION**  
[MÉTODO ALTERNATIVO PARA LA INTERPRETACIÓN FÍSICA DE LA SOLUCIÓN NUT]  
L. A. López, O. Pedraza, V. E. Ceron, R Arceo
- 25 **LOW-AUTOCORRELATION BINARY SEQUENCES EXPLORED USING WARNING PROPAGATION ALGORITHMS**  
[WARNING PROPAGATION PARA SECUENCIAS BINARIAS DE BAJA AUTOCORRELACIÓN]  
I. Kotsireas, A. Lage-Castellanos, O. E. Martínez, R. Mulet
- 31 **AN INTEGRATED  $\Delta\Sigma$  A/D ARCHITECTURE FOR SMART ISFET**  
[ARQUITECTURA INTEGRADA  $\Delta\Sigma$  A/D PARA UN SMART ISFET]  
D. Garnier-Fernández, F. Serra-Graells, C. Jiménez-Jorquera, A. Baldi-Coll, O. Arias-Fuentes
- 37 **UNDERSTADING RESISTANCE AND OHM'S LAW WITH ARDUINO-BASED EXPERIMENT**  
[COMPRENDIENDO LA RESISTENCIA Y LA LEY DE OHM CON UN EXPERIMENTO BASADO EN ARDUINO]  
R. Salar

**PARA FÍSICOS Y NO FÍSICOS**

- 43 **LA FÍSICA EN EL ORIGEN Y DESARROLLO DE LA TABLA PERIÓDICA**  
[PHYSICS IN THE ORIGIN AND DEVELOPMENT OF THE PERIODIC TABLE]  
E. Pedrero-González, F. Guzmán-Martínez, C. Rodríguez-Castellanos
- 48 **EXPLORANDO LOS AGUJEROS NEGROS**  
[EXPLORING BLACK HOLES]  
J. Pinochet

**MOMENTOS DE LA FÍSICA EN CUBA**

- 54 **LA IMPRONTA DEL PROFESOR JOAQUÍN GONZÁLEZ-ÁLVAREZ EN LA ENSEÑANZA DE LA FÍSICA EN HOLGUÍN**  
[THE IMPRINT OF PROFESSOR JOAQUÍN GONZÁLEZ-ÁLVAREZ IN THE TEACHING OF PHYSICS IN HOLGUÍN]  
S. L González-Bello, J. Alí-Sánchez

## 57 NUESTRA FÍSICA EN NOTICIAS

### OBITUARIOS

- 60 M. PIEDRA DÍAZ (5 MARZO, 1948 - 3 SEPTIEMBRE, 2020)  
R. Pérez-Álvarez, C. Trallero-Giner
- 61 J. LÓPEZ GONDAR (29 AGOSTO, 1947 - 17 FEBRERO, 2021)  
M. Bedoya

# TO TEACH OR NOT TO TEACH, THAT IS THE QUESTION: ENSEÑANDO FÍSICA EN TIEMPOS DE COVID-19

E. ALTSHULER

Editor, Revista Cubana de Física

Garantizar que un colega actúe como árbitro anónimo de un artículo, y entregue su informe en tiempo y forma, nunca ha sido una tarea sencilla. Sin embargo, durante la pandemia de COVID-19, coordinar arbitrajes demanda un esfuerzo excruciantemente. Y no se trata sólo de la Revista Cubana de Física; mi experiencia en otras como Granular Matter es similar: colegas de todo el mundo a los que he pedido que actúen como árbitros de un artículo original (personalmente o a través de algún sistema de gestión automatizado) han argumentado que no les es posible, pues impartir clases de forma remota les está consumiendo muchísimo tiempo.

En efecto, hacer su trabajo a través de la red demanda gran dedicación para los profesores. Esto se debe a varios factores. Uno de ellos es que enseñar mediante sistemas de gestión de docencia suele significar que el profesor ha de escribir una suerte de libro de texto propio, y publicarlo en la red. Otro es que, mientras que impartir clases frente a un aula es un hecho acotado en el tiempo, utilizar sistemas de gestión de docencia o redes sociales abre una puerta temporal no-acotada: fácilmente un profesor puede sorprenderse recibiendo la respuesta de una tarea de madrugada, y calificándola en tiempo real.

Durante años, la educación superior cubana ha propugnado el uso de las Tecnologías de la Información y la Comunicación (TICs)<sup>1</sup>, lo cual ha generado la elaboración de innumerables planes e informes a todos los niveles, además de algunos avances reales. Sin embargo, opino que el justificado (aunque precipitado) cierre de las aulas a raíz de la pandemia básicamente sorprendió a nuestro sistema educativo –y en general, al país– sin estar verdaderamente preparado.

Afortunadamente, hacia el mes de marzo de 2020, hubo una mejora sustancial: se implementó un canal en la red de tal suerte que tanto los profesores como los estudiantes podrían acceder gratuitamente a una plataforma cubana para el aprendizaje virtual, conocida como EVEA<sup>2</sup>. Se trata de un “oasis digital” abierto por el Ministerio de Comunicaciones y ETECSA, en el sentido de que el tiempo de conexión dedicado a él es gratuito cuando se accede desde las redes WiFi,

el Nauta Hogar, y los datos móviles. Debo enfatizar que la apertura del canal gratis EVEA ocurrió después del cierre de las aulas en muchos casos, lo que ha complicado extraordinariamente las coordinaciones entre estudiantes, profesores y administraciones involucradas.

Pero ese no ha sido el único problema. La conectividad relativamente lenta de muchas de las redes en el país es otro elemento fundamental: hasta el momento de la escritura de esta editorial, es virtualmente imposible impartir clases en tiempo real incluyendo video o audio. Si bien EVEA permite organizar correctamente los materiales de estudio y evaluaciones de un curso dado el proceso de intercambio estudiante-profesor en tiempo real básicamente tiene lugar a través de texto, e intercambio de algunas imágenes. Ello es obviamente insuficiente para una asignatura como la Física.

Pero podríamos pensar que la falta de video y audio en tiempo real apenas constituye un “lujo” que puede subsanar un docente suficientemente dedicado (y, sobre todo, capaz de teclear gran cantidad de palabras por segundo en un chat). Pero las carencias en términos de velocidad de conexión afectan críticamente las evaluaciones. ¿Cómo se puede garantizar que no ocurra algún tipo de atentado a la ética del proceso educativo cuando se pone un examen en línea, y no se puede acotar su duración a un nivel razonable, especialmente cuando el estudiante tiene forzosamente ante los ojos un dispositivo con potencial acceso a internet?<sup>3</sup> Cómo garantizar que no haya una “suplantación de identidad” cuando los profesores no pueden ver a los estudiantes “en tiempo real”?<sup>4</sup> En algunas instituciones, los profesores de Física eventualmente chequean la identidad de los examinandos vía telefónica, lo cual no es perfecto... ni gratuito. Si bien EVEA ofrece variadas herramientas para “personalizar” exámenes, existe consenso entre los colegas con los que me he entrevistado, de que no es suficiente para evitar irregularidades a la hora de evaluar.

No quiero dar la impresión de que la mayor parte de nuestros estudiantes son potenciales violadores de las reglas del proceso docente. De hecho, algunos hacen un loable esfuerzo, al

<sup>1</sup>Hasta hace unos años, el nombre comenzaba con el vocablo “Nuevas” por razones obvias, de modo que se conocían por “NTICs”.

<sup>2</sup>EVEA es un modelo cubano para el aprendizaje virtual cuyas siglas obedecen a “Entorno Virtual de Enseñanza y Aprendizaje”. Muchos conocedores sostienen que EVEA es extremadamente cercano al MOODLE, una conocida plataforma libre y abierta de aprendizaje para manejar cursos en línea.

<sup>3</sup>La baja velocidad de conexión puede hacer que los estudiantes consuman la mayor parte del tiempo disponible intentando “bajar” el cuestionario y “subir” las respuestas. En estas condiciones, no se puede estimar un tiempo de examen realista usando la media de calidad de conexión: debe usarse la peor calidad de conexión de entre todos los participantes, para no cometer injusticias. Y no se sabe a ciencia cierta de qué velocidad se trata.

<sup>4</sup>Exámenes en línea verdaderamente rigurosos, como un conocido test internacional de idioma inglés, han instrumentado un riguroso control por video personalizado durante las varias horas de la prueba, con una inspección digital del entorno del examinado, tiempo limitado para realizar necesidades fisiológicas, y sin permitir posibles pérdidas de conexión por más de poquísimos minutos. Como detalle, el simple derecho a hacer el examen está lejos de ser gratis.

estar obligados a sentarse al sol o bajo la lluvia en un “parque de WiFi” para acceder a EVEA. Pero en principio, basta con que uno o dos individuos dentro de un grupo ofendan la ética, para que el modus operandi se propague rápidamente: después de todo, no sería más que un fenómeno propio del mundo virtual. Para complejizar todo este panorama, resulta extremadamente difícil establecer remotamente la existencia de alguna violación real y, por ende, aplicar las medidas disciplinarias que corresponden. Ante las herramientas digitales, la tentación es extraordinaria: ¿qué impide tomar una cadena de caracteres de un examen en línea, y compararla sistemáticamente con todas las clases colgadas por el profesor (convenientemente también en formato digital), encontrar eficientemente la clase relevante, copiar, y pegar? Algunos colegas sospechan que esto ha ocurrido, pero ¿cómo se demuestra irrefutablemente el comportamiento deshonesto? En lo personal, he comenzado algunos de mis exámenes con una violenta “arenga ética digital”, cuyo contenido los estudiantes deben aceptar, firma digital de por medio. Es algo que antes de la pandemia nunca hubiera siquiera soñado, por considerarlo burocrático y ridículo. Creo que la arenga ha sido efectiva... pero, ¿cómo puedo garantizarlo?

Otro problema extremadamente serio de las clases remotas en el mundo de la Física es la casi imposibilidad de realizar experimentos reales. Algunas instituciones del país han orientado trabajos prácticos en la casa, como la medición del período de un péndulo casero con la ayuda del cronómetro de un teléfono digital. El proyecto se ha personalizado asignando una longitud de péndulo específica para cada estudiante. Pero, ¿Cómo podría hacerse en casa un experimento técnicamente más exigente? El uso de “prácticas virtuales” es una posibilidad, pero sinceramente creo que su generalización constituye una puñalada en el corazón de la física experimental. En mi opinión, bajo ningún concepto puede pretenderse que la mayor parte de la enseñanza experimental sea virtual: ni antes, ni durante, ni después del COVID-19.

Intentando resumir las experiencias cubanas que he experimentado directamente, o a través de intercambios con colegas, creo que existen dos parejas de escenarios que determinan la docencia de la Física usando EVEA. (a) Grupos de estudiantes pequeños vs. grandes. Impartir Física a un grupo de 40-70 estudiantes de ciencias de la vida o de alguna ingeniería en la CUJAE es muy diferente de impartir Física a un grupo de 10-20 estudiantes de Física o de Física Nuclear. La personalización de la enseñanza –muy especialmente de las evaluaciones– es mucho más asequible para los grupos pequeños. (b) Asignaturas de Física general (o teórica) vs. asignaturas especializadas (optativas). Para las primeras,

existen libros de texto que son estándares internacionales, y virtualmente cualquier problema solucionable por un ser humano se puede encontrar en internet. Para las segundas, un profesor habilidoso puede generar exámenes suficientemente originales y personalizados, que disminuyan la tentación de violar la ética docente. En lo que me compete, he experimentado con personalizar incluso la forma de evaluación de una asignatura optativa para estudiantes de Física exigiendo, en vez de un trabajo escrito, un video donde el estudiante explique, ante cámara, un tema específico.

Hasta aquí, he descrito un escenario bastante apocalíptico. Pero seamos realistas. Citaré nuevamente la parodia del célebre monólogo shakespeareano que ha servido de título: To teach or not to teach: that is the question. Creo que debemos seguir intentado enseñar física, pero con los pies en la tierra, y sin escudarnos en el triunfalismo que tanto daño ha hecho, y sigue haciendo. Debemos organizar los cursos de tal suerte que se realicen evaluaciones finales convencionales, aunque los grupos “grandes” deban “seccionarse” en otros más pequeños, para cumplir los requisitos sanitarios en tiempo de pandemia. Debemos aguzar nuestra creatividad para generar evaluaciones más personalizadas –fácil de decir, difícil de instrumentar. Debemos seguir exigiendo a todas las instancias la búsqueda de soluciones a los problemas de ancho de banda en la red cubana, la introducción de tarifas planas a precios razonables para internet, y la facilidad de compra de equipos de cómputo a precios asequibles. Debemos concebir experimentos para realizar en casa, haciendo uso de los sensores que poseen los teléfonos celulares... sin dejar de intentar retomar los laboratorios docentes “reales” en todas las ocasiones en que ello sea posible. Debemos intentar que esos laboratorios se beneficien del pensamiento creativo que, con suerte, habremos adquirido gracias a la educación remota. Debemos destilar todo lo bueno que EVEA nos puede ofrecer, para perfeccionarlo y mantenerlo incluso después de que pase la pandemia. Y debemos, desde luego, vacunarnos: volver a las aulas no es sólo el camino para impartir mejor Física; es el camino para reencontrarnos con nuestra propia humanidad.

Agradecimientos: Este texto se ha beneficiado de valiosas conversaciones (muchas de ellas virtuales) con numerosos profesores de Física. Entre ellos destacan Arbelio Pentón (Facultad de Física, U.H.), Germán Rojas (Instec, U.H.), José Llovera (CUJAE) y Nelia López (Facultad de Física, U.H.). También las revisión del texto y sugerencias de María Sánchez-Colina (Facultad de Física, U.H.) y Osvaldo de Melo (Facultad de Física, U.H.).

# STUDY BY RAMAN SPECTROSCOPY OF THE INDUCED RADIATION DAMAGE IN GaAr:Cr EXPOSED TO 20 MeV ELECTRON BEAM

## ESTUDIO MEDIANTE LA ESPECTROSCOPÍA RAMAN DEL DAÑO RADIAL INDUCIDO EN EL GaAr:Cr EXPUESTO A UN HAZ DE ELECTRÓNOS DE 20 MeV

A. LEYVA-FABELO<sup>a,b†</sup>, D. LEYVA-PERNÍA<sup>c</sup>, J. A. RUBIERA-GIMENO<sup>c</sup>, C. M. CRUZ-INCLÁN<sup>a</sup>, JORGE L. VALDÉS-ALBUERNES<sup>d</sup>, V. KOBETS<sup>b</sup>, S. ABOU-EL-AZM<sup>b</sup>, U. KRUCHONAK<sup>b</sup>, A. ZHEMCHUGOV<sup>b</sup>, G. SHELKOV<sup>b</sup>, A. PÁEZ-RODRÍGUEZ<sup>d</sup>, M. MAYETA-AGUILERA<sup>d</sup>

a) Centro de Aplicaciones Tecnológicas y Desarrollo Nuclear (CEADEN), Havana, Cuba; aleyva@jinr.ru<sup>†</sup>

b) Joint Institute for Nuclear Research (JINR), Dubna, Russian Federation

c) Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC), Havana, Cuba

d) Centro de Estudios Avanzados (CEA), Havana, Cuba.

† corresponding author

Recibido 24/11/2020; Aceptado 30/1/2021

In this work, we use Raman spectroscopy to search for evidence of possible radiation damage in a chromium-compensated gallium arsenide semiconductor detector exposed to a 20 MeV electron beam. The Raman spectra measured before and after irradiation were deconvoluted, and their analysis shows that relevant processes stimulated by radiation take place in the material. These processes lead to the relaxation of the structure tensional state, the enhancement of crystallinity, and a decrease in the concentration of free carriers, which in the studied sample volume reaches 2.31 %. The observed changes could be related to the generation of new Frenkel-type defects in the arsenic sublattice, and to radiation-stimulated changes in the quantity and quality of pre-existing more complex defects.

En este trabajo la espectroscopía Raman ha sido empleada en la búsqueda de evidencias del posible daño radiacional en un detector semiconductor de radiaciones de arseniuro de galio compensado con cromo al ser expuesto a un haz de electrones de 20 MeV. Los espectros Raman tomados antes y después de la irradiación fueron deconvolucionados y su análisis mostraron que efectivamente en el material estaban teniendo lugar significativos procesos estimulados por la radiación. Estos procesos conducen a la relajación del estado tensional de la estructura, al incremento de la cristalinidad, y a la disminución de la concentración de portadores libres, que en el volumen estudiado de la muestra alcanza un 2.31 %. Los cambios observados deben estar relacionados con la generación de defectos de tipo Frenkel en la subred del arsénico, y a cambios radiacionalmente estimulados en la cantidad y características de defectos preexistente de mayor complejidad.

PACS: Raman spectroscopy and Raman spectra of semiconductor (espectroscopía Raman y espectro Raman de semiconductores), 42.65.Dr, 78.30.Am; semiconductor detector for nuclear physics (detectores semiconductores para la física nuclear), 29.40.Wk; irradiation effects in solids (efectos de la radiación en sólidos), 61.80.-x

## I. INTRODUCTION

Raman spectroscopy is a technique based on inelastic scattering of monochromatic light in matter, able to provide information about vibrational, rotational, and other low-frequency transitions in molecules [1]. This information provides a distinct chemical fingerprint for a particular molecule or material and can be used to identify the material quickly, to study its chemical structure, phases, polymorphism, intrinsic stress/strain, contamination, and variation in crystallinity, among other purposes. Raman spectroscopy is suitable for the analysis of solids, powders, liquids, gels, and gases. For example, for solids is one of the most popular tools for investigating the basic properties of semiconductors [2].

Studies carried out based on this technique in semiconductors, such as Si, Ge, CdTe, HgI<sub>2</sub>, TlBr, and GaAs, are widely reported in the literature, e. g. [3–5]. These elements and compounds have in common that they are used to produce and develop ionizing radiation detectors [6]. Among them, the GaAs compound, is attracting particular interest. This is because, in addition to having good detection efficiency,

high charge carrier mobilities, low noise, and the possibility of operating at room temperature [7], it was found that when chromium dopant is introduced into the material during a post-production process, it becomes more resistant to radiation damage [8]. These features make chromium compensated gallium arsenide (GaAs:Cr) a promising option for the development of ionizing radiation detectors intended for research in the fields of high energies and nuclear physics [9].

The detector's performance strongly depends on the device material's structural and electronic properties. These properties can be affected when exposed to ionizing radiation. Consequently, an exhaustive study of the semiconductor properties' behavior when exposed to ionizing radiation is necessary. This type of study is essential for the safe and reliable use of the device. In this work, we use Raman spectroscopy to study the effect on some properties of a GaAs:Cr sample exposed to a 20 MeV electron beam. The methodology we apply is based on the comparative analysis of the Raman spectra measured before and after the irradiation procedure.

## II. MATERIALS AND METHODS

Figure 1 shows the photo of a high resistivity GaAs:Cr detector employed as the target in the experiment. This detector is a  $300\text{ }\mu\text{m}$  thick sensor with an area of  $4.5 \times 4.5\text{ mm}^2$  and a  $1\text{ }\mu\text{m}$  thick nickel square anode ( $1.8 \times 1.8\text{ mm}^2$  area) on one of its surfaces.

The GaAs:Cr has a zinc blende type of crystal structure, wherein a very certain percentage of the native Ga atoms is substituted by the dopants Cr atoms (deep acceptors), and the native As atoms were substituted by the dopants Te atoms (shallow donors), as represented in Figure 2.

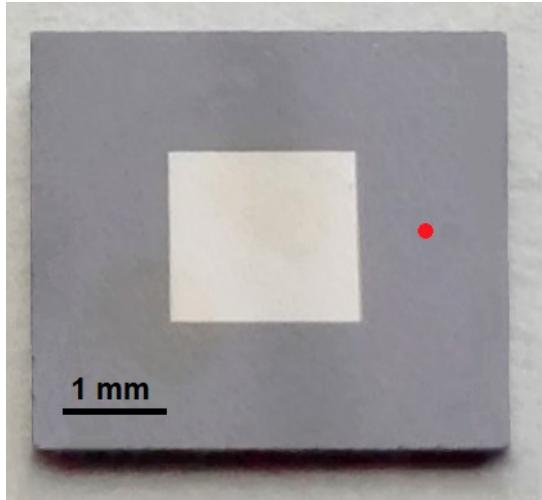


Figure 1. Photo of the target:  $300\text{ }\mu\text{m}$  thick GaAs:Cr detector, showing the surface exposed to radiation and in the center with square shape and lighter color the Ni electrode (cathode). The red circle to the right of the electrode shows a typical location of the laser spot on the detector surface.

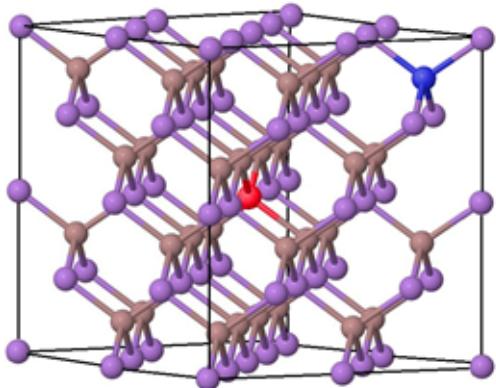


Figure 2. Representation of GaAs:Cr supercell, where Ga and As atoms are identified by violet and brown spheres respectively. The Cr (in red) and Te (in blue) atoms have been conventionally positioned in places they can occupy in the crystalline structure.

The target sample is irradiated at room temperature with 20 MeV electrons on the LINAC-800 linear accelerator in the Dzhelepov Laboratory of Nuclear Problems (DZLNP) of Joint Institute of Nuclear Research (JINR). The irradiation takes place orthogonal to the surface where the detector has the Ni electrode, covering the entire sample. The beam characteristics are: energy of the electrons  $E_{e^-} = 20\text{ MeV}$ , intensity of the current  $I = 10\text{ mA}$ , frequency  $f = 10\text{ Hz}$ , pulse length  $\Delta t = 1.5$

$\mu\text{s}$ , total irradiation time  $T_{irrad} = 30\text{ min}$ . The estimation of the total fluence in the irradiated sample resulting in  $\phi = 1.8643 \times 10^{14}\text{ e}^-/\text{cm}^2$ .

The Raman measurements are done at room temperature in the backscattering geometry [10], using a spectrometer model CARS Solar TII, and applying the following conditions: diffraction grating of 1200 lines/mm, objective 40x (model Olympus-UPlanFL N), and acquisition time 70 s. Figure 3 shows a schematic of the Raman spectrometer working in a backscattering geometry regime.

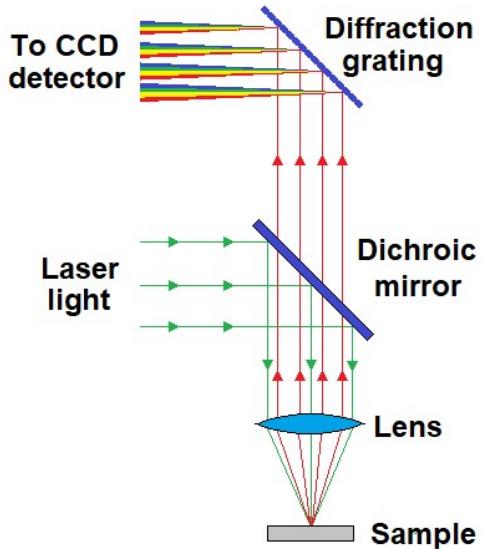


Figure 3. Schematic of the backscattering geometry in Raman spectrometer.

To obtain the Raman spectra, the excitation He–Ne laser (632.8 nm) of the spectrometer was focused on a region of the sample input surface away from the metal electrode, and from the edges of the crystal. A typical location of the laser spot ( $d = 50\text{ }\mu\text{m}$ ) on the studied surface is shown in figure 1.

The post-processing of the spectra was performed using the software package ORIGIN v.9 [11].

## III. PROCESSING AND ANALYSIS OF THE RAMAN SPECTRA

The obtained Raman spectra of the studied target before and after irradiation are presented superposed in figure 4.

In both spectra, it is possible to observe the presence of a predominant, sharp and intense line at  $\sim 292\text{ cm}^{-1}$ , corresponding to the allowed longitudinal optical (LO) Ga–As phonon mode at the  $\Gamma$  point of the Brillouin zone, which agrees with the experimental results reported in literature [12, 13].

Also, there is a low-intensity mode observed at  $\sim 268\text{ cm}^{-1}$ . This vibration is attributed to the transverse optical (TO) Ga–As phonon mode forbidden by the selection rules for Raman scattering. This relatively low-intensity mode can appear in the Raman spectrum due to the violation of symmetry in the sample because of some structural disorder

induced by the incorporation of dopants [13], or as the consequences of the negligible amount of misoriented crystals present in the material [14]. In any case, the TO phonon mode indicates the presence of defects in the GaAs layer [15].

In the literature it is reported that any deviation from the strict backscatter geometry in the measurement can also contribute to the observation of the TO mode. That is, when the focused light beam from the excitation laser is not strictly orthogonal to the sample surface, then TO peaks appear as a result of leakage, as described in [16].

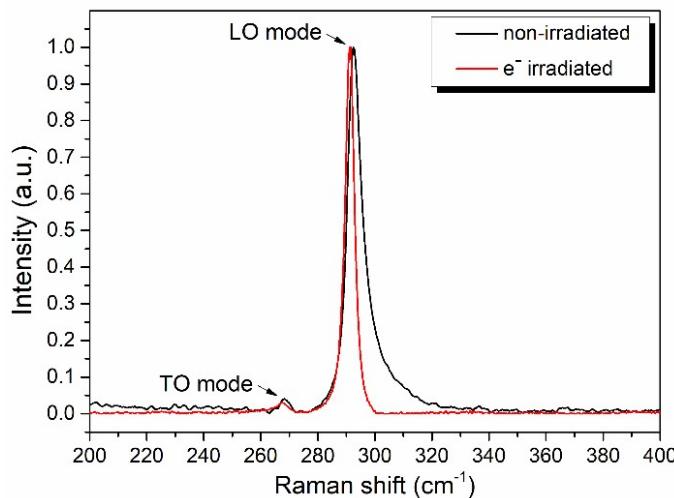


Figure 4. Comparison of Raman spectra obtained before and after irradiation.

In the non-irradiated sample, at frequencies below 255 cm<sup>-1</sup> it is observed that the intensity of the background signal is increased. This may be the result of various phenomena, such as the presence of vibrational modes related to the existence of arsenic precipitates (clusters) on the sample resulting from crystal synthesis [13]. In this spectral region, the presence of a broad feature is also reported in the literature. There, the authors consider that this presence results from different types of disorder-activated modes originated from the amorphous continuous random network and medium-range ordering [12, 16, 17]. After irradiation, this observed broad low-frequency feature practically disappears.

Figure 4 shows that the LO peaks have an asymmetric line-shape broadening, more markedly for the non-irradiated sample. Several factors contribute to this asymmetry, such as the presence of the surface optical mode SO, always found between LO and TO phonon peaks, and usually observed when the translational symmetry of the surface potential is broken, activating the long wave vector SO phonon modes [18]. The complementary vibrational modes resulting from the coupling between LO phonons and plasmons [19], which we will analyze further ahead, also contribute significantly to this asymmetry.

The spectra deconvolutions were performed in the interval between 260 and 325 cm<sup>-1</sup> using the full width at half maximum (FWHM) version of the Gaussian function, defined

by the equation 1:

$$y = y_0 + \frac{A \exp\left(\frac{-4 \ln 2(x-x_c)^2}{w^2}\right)}{w \sqrt{\frac{\pi}{4 \ln 2}}}, \quad (1)$$

where  $y_0$  is the base,  $A$  is the peak area,  $x_c$  is the position of the center of the peak, and  $w$  is the FWHM [20].

The best-obtained fitting results are presented in figures 5(a) and (b), and a summary of the main characteristics of the most important adjusted peaks, and the relationships between some of them are shown in the table 1.

In both deconvoluted spectra, the TO and LO optical modes are adequately identified because their peaks are observed at the expected frequencies, ~ 268 and ~ 292 cm<sup>-1</sup> respectively, and also standing out in their intensity and lower FWHM.

As known, in polar semiconductors, modes related to the collective oscillations of the free-carrier system (plasmons) emerge in addition to the optical modes, and with increasing carrier concentration the plasmon frequency approaches the longitudinal optical mode frequency. Strong electrostatic coupling of the plasmon mode to the LO mode occurs when the plasmon frequency passes through the LO phonon frequency [21]. It results in two LO phonon-plasmon coupled (LOPC) modes (the upper branch mode L<sup>+</sup> and the lower branch mode L<sup>-</sup>), for a given plasma frequency [22].

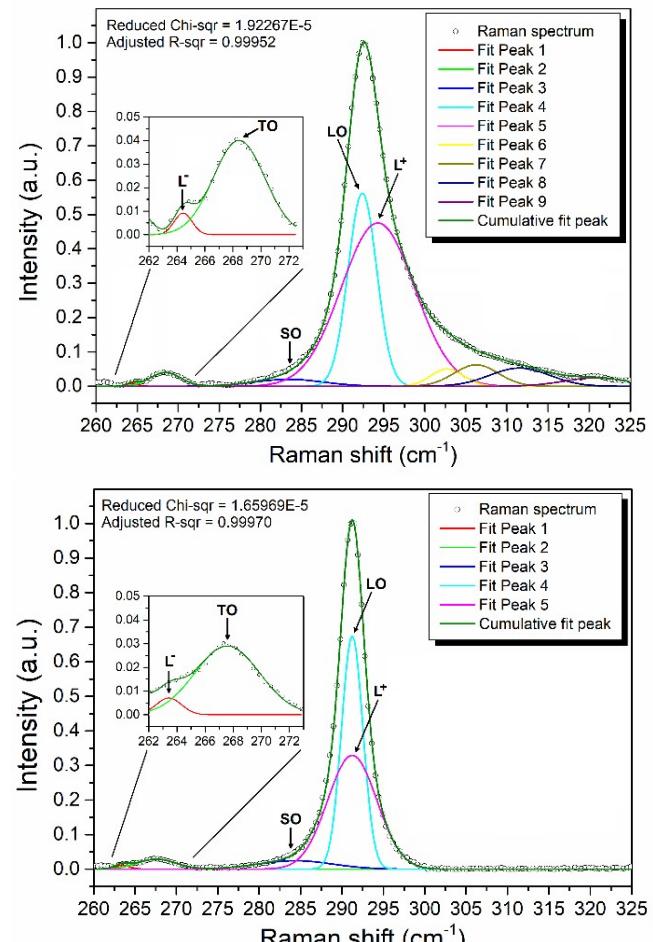


Figure 5. Deconvoluted Raman spectra of target sample before (top) and after (bottom) the electron irradiation. Inserted in each image are shown expanded relevant regions of the spectra.

Table 1. Mean characteristics of the deconvoluted spectra.

GaAs:Cr sample →		Non-irradiated	Irradiated
Raman shift ( $\text{cm}^{-1}$ )	TO	268.4365 (401)	267.5786 (941)
	LO	292.4071 (1783)	291.2390 (814)
	SO	283.4500 (46797)	284.3538 (22955)
	$L^-$	264.4406 (994)	263.4308 (3784)
	$L^+$	294.2957 (238)	291.2416 (824)
Raman intensity (a.u.)	$I_{\text{TO}}$	0.0401	0.0290
	$I_{\text{LO}}$	0.5621	0.6732
	$I_{\text{SO}}$	0.0201	0.0246
	$I_{L^-}$	0.0091	0.0114
	$I_{L^+}$	0.4754	0.3290
$I_{\text{TO}}/I_{\text{LO}}$	$I_{\text{TO}}/I_{\text{LO}}$	0.0712	0.0431
$L^+ - L^- (\text{cm}^{-1})$	$\delta L^\pm$	29.8552	27.8107
$\text{TO}_{\text{non-irrad}} - \text{TO}_{\text{irrad}} (\text{cm}^{-1})$	$\Delta \text{TO}$		0.8579
$\text{LO}_{\text{non-irrad}} - \text{LO}_{\text{irrad}} (\text{cm}^{-1})$	$\Delta \text{LO}$		1.1680
$L^-_{\text{non-irrad}} - L^-_{\text{irrad}} (\text{cm}^{-1})$	$\Delta L^-$		1.0098
$L^+_{\text{non-irrad}} - L^+_{\text{irrad}} (\text{cm}^{-1})$	$\Delta L^+$		3.0542

The LOPC  $L^-$  mode is located to the left of the TO transverse mode, but it is often difficult to observe because it is superimposed with the latter. In this study, as can be seen in the images inserted in figures 5(a) and (b), the two peaks were resolved and their characteristics defined. At higher frequency than LO, although very close, with broad FWHM and significant intensity, can be identified the  $L^+$  mode. These LOPC modes can mediate the carrier lattice energy exchange and thus play an important role in the electrical characteristics of semiconductor-based devices [23].

The presence of the  $L^+$  mode shifted  $1.89 \text{ cm}^{-1}$  towards the high frequencies with respect to the LO mode in the non-irradiated sample decisively influences the non-symmetric broadening of the observed peak attributed to longitudinal vibration.

Although theoretically two LOPC are expected, by fitting the experimental spectrum of nonirradiated sample, it was not possible to extract only two single modes, but additional 3-4 modes are visible at frequencies higher than the one corresponding to LO (figure 5(a)). Similar behavior is already reported in [24]. There the authors associate this result to the complicated behavior of the optical phonons interactions with the multicomponent and inhomogeneous photoexcited electron-hole plasma, which is revealed in the Raman spectrum by the presence of an increased number of LOPC high-frequency modes.

After irradiation, Raman spectrum deconvolution showed a simpler structure (figure 5 (b)). Now the broad feature that previously appeared for frequencies higher than  $\sim 292 \text{ cm}^{-1}$  practically has disappeared. This fact, together with the shift to red of  $L^+$  and  $L^-$ , as well as the decrease in intensity of  $L^+$  mode, indicates that the coupling between LO and plasmons has weakened. It is known that the higher the free carrier density, the larger is the frequency separation of the coupled modes [21]; and in the current experiment the distance between

$L^-$  and  $L^+$  modes in the pristine sample was  $29.8552 \text{ cm}^{-1}$ , and after the exposure drops to  $27.8107 \text{ cm}^{-1}$ , 6.85 % lower, supporting the hypothesis that was taken place a reduction in the free charge carrier density. The strong smoothing with the exposure observed in the marked asymmetry manifested to the right of the LO mode must be related to this fact, the weakening of the coupling between the optical mode and the plasmons.

The theory of scattering in doped semiconductors, without considering the damping of plasmons and phonons, allows obtaining the expression 2 for the frequencies of the  $L^+$  and  $L^-$  coupled phonon-plasmon modes ( $w_+$  and  $w_-$  respectively) [25, 26].

$$w_\pm^2 = \frac{1}{2} \left[ (w_p^2 + w_{\text{LO}}^2) \pm \left\{ (w_p^2 + w_{\text{LO}}^2)^2 - 4w_p^2 w_{\text{TO}}^2 \right\}^{1/2} \right], \quad (2)$$

where  $w_{\text{LO}}$ ,  $w_{\text{TO}}$  are the frequencies of LO and TO phonon modes, and  $w_p$  is the plasmon frequency. The frequency  $w_p$  may be expressed by 3 [27]:

$$w_p = \sqrt{\frac{ne^2}{m^* \epsilon_0 \epsilon_\infty}}, \quad (3)$$

where  $n$  is the charge carrier concentration,  $e$  is the electric charge,  $\epsilon_0$  is permittivity of the space,  $\epsilon_\infty$  is the high-frequency dielectric constant and  $m^*$  is the charge carrier effective mass.

From equations 2 and 3 it is possible to calculate the concentration of the charge carriers from the determined by Raman frequencies of the LOPC and LO modes.

For non-irradiated sample, the free carrier concentration was found to be  $2.3663 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , and for irradiated  $2.3117 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . As anticipated above, the free carrier concentration has been decreased, in this case about 2.31 %, as a result of exposure to 20 MeV electrons.

This slight free carrier concentration change in the irradiated sample must be related to the generated by incident electrons intrinsic defects in the target material. These primary defects occur mainly in the As sublattice in the form of immobile As vacancies,  $V_{As}$ , and As interstitials,  $As_i$ , thus forming a Frenkel pair. Precisely associated with these defects in the arsenic sublattice are the electron traps (labeled E1-E5), and hole traps (labeled H0 and H1). Defects in the Ga sublattice ( $V_{Ga}$  and  $Ga_i$ ) are also possible, but they recombine very quickly [28] without having any significant contribution to the total defect density. In [29] also was verified that the carrier removal is dominated by isolated defect production for incident electrons with energy at least up to  $\sim 50$  MeV.

The deconvoluted spectrum of the target sample after the electron irradiation also shows, as can be seen in figures 5(a) and (b) and in table 1, that the TO and LO modes slightly moved towards low frequencies (0.8579 and 1.1680  $\text{cm}^{-1}$  respectively).

The redshift of the phonon optical modes can be linked to a certain relaxation in the structure [30]. This phenomenon is the result of the radiation-induced defect generation in the crystalline network, which may contribute to annihilating or decreasing the dimensions of more complex defects, such as dislocations, clusters, or some other structural disorder induced by the incorporation of dopants, for example [13].

Finally, it is known that the relationship of the TO and LO components intensities ( $I_{TO}/I_{LO}$ ) is an indicator that follows the processes of amorphization or crystallization [14]. The decrease observed in  $I_{TO}/I_{LO}$  (see table 1) suggests a transformation of the amorphous component into the crystalline component, that is, an enhancement of the crystallinity of the target is seen as a consequence of low dose irradiation. Additionally, the decrease in FWHM manifested by the LO peak after electron irradiation of the sample confirms that the crystallinity has improved [16]. Another indicator of the strengthening of crystallinity is the attenuation and virtual disappearance of the artifacts that were seen at low frequencies before irradiating.

#### IV. CONCLUSIONS

The Raman spectra analysis of the GaAs:Cr target measured before and after being exposed to 20 MeV electron beam allowed us to reach the following conclusions. After irradiation, there was a simplification of the complex spectral structure observed in the virgin sample, as well as a significant decrease in the asymmetry of the peak corresponding to the longitudinal optical mode. It was observed a shift to red of  $L^+$  and  $L^-$ , as well as a decrease in intensity of  $L^+$  mode. The distance between both phonon-plasmon coupled modes in the non-irradiated sample was 6.85 % higher compared with the irradiated one. Both TO and LO modes slightly moved towards low frequencies after the exposition, and its intensity relationship decreases, together with the narrowing of LO. All these facts suggest that processes stimulated by radiation are taking place, leading to the relaxation of the structure tensional state, an enhancement of the crystallinity, and the

decrease of the free carrier concentration in about 2.31 %. These processes can be related to the generation of Frenkel type defects in the arsenic sublattice, and changes in the quantity and quality of existing more complex defects.

#### ACKNOWLEDGMENTS

This research is the result of the collaboration between the JINR (Russian Federation) and scientific institutions of CITMA (Cuba), within the framework of Project number 04-2-1126-2015/2023 managed by the DLNP-JINR.

#### REFERENCES

- [1] P. Vandenabeele, Practical Raman Spectroscopy - An Introduction, 1st ed., John Wiley & Sons, Inc. (New Jersey, 2013).
- [2] S. Nakashima and H. Harima, Raman Spectroscopy of Semiconductors, Handbook of Vibrational Spectroscopy, Ed. J. M. Chalmers and P. R. Griffiths, John Wiley & Sons., (New York, 2006).
- [3] N. N. Ovsyuk, S. G. Lyapin, Appl. Phys. Lett. **116**, 062103, (2020).
- [4] C. Olvera-Felix, R. Ramirez-Bon, R. Ochoa-Landín, *et al.*, J. Electron. Mater. **49**, 1257 (2020).
- [5] W. Hernández, Y. Kudriavtsev, C. Salinas-Fuentes, *et al.*, Vacuum **171**, 108976 (2020).
- [6] B. D. Milbrath, A. J. Peurrung, M. Bliss, *et al.*, J. Mater. Res. **23**, 2561 (2008).
- [7] A. Šagátová, B. Zatko, V. Necas, *et al.*, Appl. Surf. Sci. **461**, 3 (2018).
- [8] K. Afanaciev, M. Bergholz, P. Bennett, *et al.*, J. Instrum. **7**, P11022 (2012).
- [9] S. S. Khladkov, V. E. Stepanov, O. P. Tolbanov, J. Phys. D: Appl. Phys. **29**, 1559 (1996).
- [10] J. Ferraro, K. Nakamoto, Ch. W. Brown, Introductory Raman Spectroscopy, Chap. 2 - Instrumentation and Experimental Techniques, 2nd Edition, Academic Press, (Amsterdam, 2003).
- [11] Origin v.9.0., OriginLab Corporation, (Northampton, MA, 2012).
- [12] S. Mishra, D. Kabiraj, A. Roy, S. Ghosh, Sol. Stat. Comm. **150**, 1892 (2010).
- [13] P. V. Seredin, A. V. Fedyukin, I. N. Arsentyev, *et al.*, Semiconductors **50**, 853 (2016).
- [14] S. Mishra, D. Kabiraj, A. Roy, S. Ghosh, J. Raman Spectrosc. **43**, 344 (2012).
- [15] C. Weisbuch and B. Vinter, Quantum semiconductor structures: Fundamentals and applications, Advanced Materials (Book Review) 4(6), Academic Press, (London, 1991).
- [16] D. S. Jiang, X. P. Li, B. Q. Sun, *et al.*, J. Phys. D: Appl. Phys. **32**, 629 (1999).
- [17] U. V. Desnica, I. D. Desnica-Frankovic, M. Ivanda, *et al.*, Phys. Rev. B **55**, 16205 (1997).
- [18] N. Begum, A. S. Bhatti, F. Jabeen, *et al.*, J. Appl. Phys. **106**, 114317 (2009).

- [19] G. Abstreiter, M. Cardona, A. Pinczuk, Light scattering by free carrier excitations in semiconductors, Light Scattering in Solids IV, Chap. 2, Springer-Verlag, (Berlin, 1984).
- [20] W. R. Leo, Techniques for Nuclear and Particle Physics Experiments, Chap. 4, Statistics and the Treatment of Experimental Data, Springer-Verlag, (Berlin, Heidelberg, 1994).
- [21] D. Varandani, N. Dilawar, B. R. Chakraborty, *et al.*, J. Mat. Sci. Lett. **20**, 5 (2001).
- [22] R. Fukasawa, S. Perkowitz, Phys. Rev. B **50**, 14119 (1994).
- [23] M. Rocca, Plasmon-Phonon coupling in semiconductor, Physics of Solid Surfaces, Landolt-Börnstein - Group III Condensed Matter 45(A), Springer-Verlag, (Berlin, Heidelberg, 2015).
- [24] R. Srnanek, G. Irmer, D. Donoval, *et al.*, Appl. Surf. Sci. **254**, 4845 (2008).
- [25] L. P. Avakyants, P. Yu. Bokov, N. A. Volchkov, *et al.*, Opt. Spectrosc. **102**, 712 (2007).
- [26] V. A. Volodin, M. P. Sinyukov, B. R. Semyagin, *et al.*, Solid State Commun. **224**, 21 (2015).
- [27] P. A. Grandt, A. E. Griffith, M. O. Manasreh, Appl. Phys. Lett. **85**, 4905 (2004).
- [28] D. Stievenard, X. Boddaert, J. C. Bourgoin, *et al.*, Phys. Rev. B **41**, 5271 (1990).
- [29] W. H. Kalma, R. A. Berger, C. J. Fischer, *et al.*, IEEE Trans. Nucl. Sc. **22**, 2277 (1975).
- [30] T. W. Kang, Y. D. Woo and T. W. Kim, Thin Solid Films **279**, 14 (1996).

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.



# QUANTITATIVE SURFACE MORPHOLOGY ANALYSIS USING ROUGHNESS PARAMETERS

## ANALISIS CUANTITATIVO DE LA MORFOLOGÍA SUPERFICIAL USANDO LOS PARAMETROS DE RUGOSIDAD

M.P. HERNÁNDEZ<sup>a†</sup>, G. HERNÁNDEZ<sup>b</sup>

a) Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, Zapata y G, El Vedado, Plaza de la Revolución, La Habana 10400, Cuba; mayrap@imre.uh.cu<sup>t</sup>

b) División de Validación y Metrología (ESINES). 198 entre 17 y 19, Rpto Siboney, Playa, La Habana 11300, Cuba.

<sup>t</sup> corresponding author

Recibido 24/4/2020; Aceptado 4/3/2021

The surface morphology of CdS thin films heat treated with CdCl<sub>2</sub> after growth has been quantified from atomic force microscopy micrographs using roughness parameters: roughness average ( $R_a$ ), root mean square (RMS) and maximum height of the profile ( $R_{p-v}$ ). The CdS thin films were grown by Close Space Sublimation (CSS) with source temperature of the CdS ( $T_{Sour}$ ) at 650°C and at four substrate temperatures ( $T_{Sub}$ ): 200, 300, 350 and 450°C. The wet CdCl<sub>2</sub> treatment on CdS was performed depositing drops of methanol solution containing CdCl<sub>2</sub> at 0.5 wt. %, blowing it with air and then letting it dry at room temperature. The results showed that the surface roughness of CdS film depended on the substrate temperature during the growth process and the CdCl<sub>2</sub> heat treatment times. The changes of the roughness were linked directly to the recrystallization process. The roughness parameters demonstrate its efficiency in the quantification of the surface morphology and excellent tool for the evaluation of the technology process.

The superficial morphology of CdS thin films heat treated with CdCl<sub>2</sub> after growth has been quantified from atomic force microscopy micrographs using roughness parameters: roughness average ( $R_a$ ), root mean square (RMS) and maximum height of the profile ( $R_{p-v}$ ). The CdS thin films were grown by Close Space Sublimation (CSS) with source temperature of the CdS ( $T_{Sour}$ ) at 650°C and at four substrate temperatures ( $T_{Sub}$ ): 200, 300, 350 and 450°C. The wet CdCl<sub>2</sub> treatment on CdS was performed depositing drops of methanol solution containing CdCl<sub>2</sub> at 0.5 wt. %, blowing it with air and then letting it dry at room temperature. The results showed that the surface roughness of CdS film depended on the substrate temperature during the growth process and the CdCl<sub>2</sub> heat treatment times. The changes of the roughness were linked directly to the recrystallization process. The roughness parameters demonstrate its efficiency in the quantification of the surface morphology and excellent tool for the evaluation of the technology process.

PACS: Acoustical properties of solid surfaces and interfaces (propiedades acústicas de interfaces y superficies sólidas), 68.35.lv; structure and roughness of interfaces (estructura y rugosidad de interfaces), 68.35.Ct; impurities in thin films (impurezas en capas delgadas), 68.55.Ln.

### I. INTRODUCTION

Quantification of the surface morphology is important to clarify a number of phenomena including adsorption on surfaces, fracture, aggregation of colloids, and electrical properties [1]. The studies on roughness evolution in thin films can lead to a better understanding of the processes themselves, perhaps even at atomistic levels.

The concept of texture is associated to the three dimensional presentation of the real surface morphology. Surface texture is the repetitive or random deviation from the nominal surface that forms the three dimensional topography of the surface. Surface texture includes the roughness (nano- and microroughness), formed by fluctuations in the surface of short wavelengths, characterized by hills (local maxima) and valleys (local minima) of varying amplitudes and spacing [2].

The roughness has statistical implications as it takes into consideration factors such as sample size and sampling interval. It is quantified by the vertical spacing of a real surface from its ideal form. If these spacing is large, the surface is

rough; if it is small the surface is smooth. The roughness can be characterized, for example, by height parameters, wavelength parameters, spacing and hybrid parameters [3].

Eventually, the characterization technique of the surface involves concepts of fractal geometry, which are widely used to describe the surface morphology [4]. The fractal approach has the ability to characterize surface roughness by scale independent parameters and provides information on the roughness structure at all length scales that exhibit the fractal behavior.

The studies of surfaces provide insight into the fundamental growth dynamics and enables one to control the roughness of the films. The kinetic roughening theory has received special attention for its usefulness to studies on roughness evolution in thin films grown under far-from-equilibrium conditions [5]. Typically, roughness of a surface evolves as a consequence of simultaneous atomic scale processes such as direct addition of atoms on the growing surface from the surrounding, removal of atoms from the surface and motion of atoms along the

surface or diffusive mass transport [6].

Atomic force microscopy (AFM) has been developed to obtain a micrograph of a material surface on a molecular scale. AFM is a nondestructive imaging technique which provides three dimensional surface topographies with high information density in a digital format amenable to mathematical analysis. Surface structures are characterized on the scale of nanometers to microns. Also, the application of AFM has been extended beyond the analysis of metals and conventional semiconductors to a wide range of materials. Thus, it seems that AFM is an obvious and attractive technique for morphology analysis that can provide direct measurements of the surface.

In deposition processes used to fabricate thin solid films, there is a very sensitive and complex dependence of film microstructure on growth conditions [7]. This microstructure has a profound incidence on all physical properties (electrical, mechanical, optical, etc.) of the film [8–10].

In particular, in the polycrystalline semiconductors, the trapping of charge at the grain boundaries has a decisive influence on the electrical transport properties through the formation of electrostatic potential barriers. There is a great technological interest in polycrystalline materials because the manufacturing process is cheap and versatile. Among them are the III-V, II-VI, IV-IV compounds like GaAs, ZnO and SiC, metal oxides ( $TiO_2$ ,  $SnO_2$ ,  $BaTiO_3$ ,  $SrTiO_3$ ) or ternary ( $CuInSe_2$ ,  $Hg_{1-x}Mn_xTe$ ,  $(BiSb)_2Te_3$ ), which are used in electronic devices, optic fibers, interferential filters, other applications [11–14].

$CdS$  films have been grown using a variety of growth techniques [15–17]. Depending on the growth technique, microstructure and impurity inclusions are going to vary. Among the many heat treatment methods available, the one using a thin  $CdCl_2$  coating followed by heat treatment in air is well known to greatly improve the structural and the electrical properties of  $CdS$  quality and  $CdS/CdTe$  solar cell efficiency [18–20]. The effect of chlorine treatment on  $CdTe$  solar cells is possibly the single most studied topic of the field owing to the vast array of structural and electrical changes it induces within the device.

The objective of this work is to describe the surface evolution of the as grown  $CdS$  and treated by  $CdCl_2$  from the quantitative morphology analysis. The roughness parameters were calculated using AFM micrographs. The variation of the roughness provoked by the substrate temperature in the growth process and the heat treatment time the  $CdCl_2$  were correlated with the grain boundary, grain size and the microstructure illustrating the importance of quantification of the surface morphology as a tool for the control of the physical properties of the films.

## II. EXPERIMENTAL DETAILS

### II.1. Growth thin films of $CdS$

The samples were prepared by CSS with a base pressure of  $10^{-5}$  Torr using ITO glass as substrate. The raw material was

$CdS$  powder (99.99 at. % purity) from Balzers. For all thin films, the  $CdS$  source maintained the temperature at  $T_{Sour} = 650^\circ C$  during the growth process using  $T_{Sub}$  ranging from 200 to  $450^\circ C$ .

The source and substrate heaters were graphite blocks. The measurements of the source and substrate temperatures were obtained by cromel-alumel thermocouple, which was placed in an orifice inside the graphite blocks. The gas used during the film growth was argon (99.999 at. % pure) from Matheson. The deposition time of the growth was 2 min.

### II.2. Procedure with $CdCl_2$

15 drops of the methanol solution containing  $CdCl_2$  at 0.5 wt. % are deposited on the surface of the  $CdS$ , blowing it with air and then letting it dry at room temperature. The  $CdS$  films received thermal treatments after the deposition of  $CdCl_2$ .

### II.3. Analysis structural of $CdS$ films

XRD analysis was used to recognize the structural phases and to evaluate the crystalline size. X-ray diffractograms were made with a Krubel diffractometer using the  $CuK\alpha$ , radiation with  $\lambda_1 = 1.54056\text{\AA}$  and  $\lambda_2 = 1.54439\text{\AA}$ . A XRD patterns were recorded in the range  $20^\circ - 70^\circ$  with a step size of  $0.02^\circ$ .

### II.4. Analysis of the surface

Atomic Force Microscope (Auto probe CP from Park Scientific) in air operating in contact mode was used to analyze the surface morphology. Measurements were performed with Si tips. AFM micrographs were acquired outside central and border regions of the films. The micrographs processing used Nanotec WSxM 5.0 Develop 9.1 software [21]. Roughness parameters: height average ( $\bar{Z}$ ), roughness average ( $R_a$ ), root mean square ( $RMS$ ) and maximum height of the profile ( $R_{p-v}$ ) described the surface morphology [3].(see Appendix)

The 3D contour graphics were constructed in MathCad 7.0 software. Inside them, the (X,Y) plane corresponded to the  $CdS$  surface and the Z projection represented the roughness parameter.

## III. RESULTS AND DISCUSSION

### III.1. Evaluation of the surface roughness homogeneity

In order to evaluate the surface roughness homogeneity of the as grown and  $CdCl_2$ -treated  $CdS$  films, AFM micrographs were acquired in two radial directions, which were perpendicular to each other.

Figure 1 displays 3D contour graphics of  $R_a$ . Figure 1a shows the  $CdS$  films grown at  $T_{Sour} = 650^\circ C$  and  $T_{sub} = 350^\circ C$  and Figure 1b corresponds to the  $CdS$  films treated by 0.5 wt. % $CdCl_2$  in methanol. After, the films with  $CdCl_2$  treatment was heated at  $500^\circ C$  for 15 min in the air. The black arrows

to the right and left of the 3D contour graphics indicate the position of the current electrodes in the graphite block and the direction of the current. The thermocouple immersed into graphite block was located on the center surface.

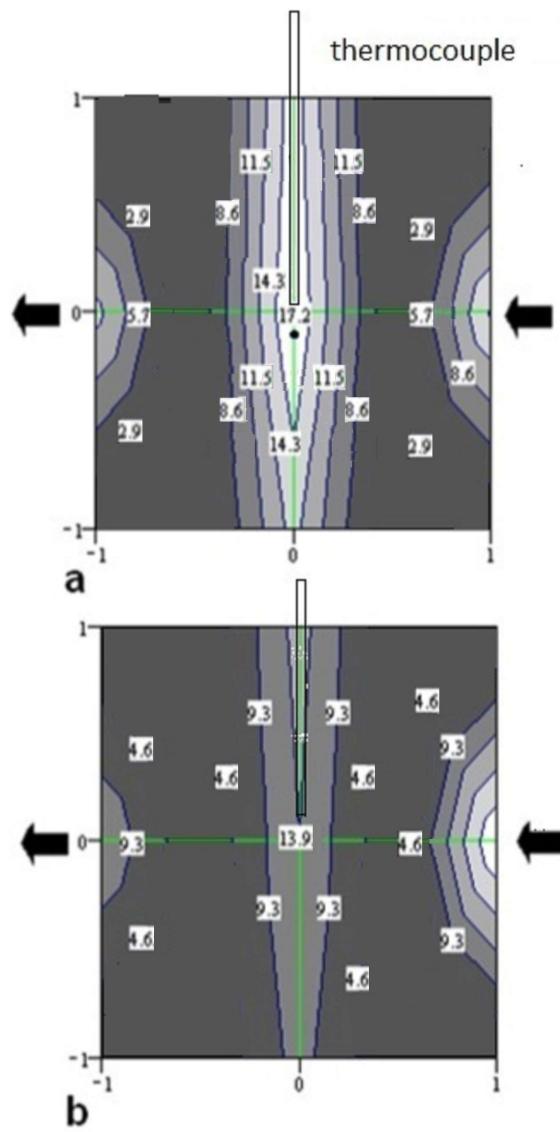


Figure 1. 3D contour graphics of the  $R_a$  parameter for : a) as grown CdS film, which grown on ITO glass slides at  $T_{Sour}$  at  $650^{\circ}\text{C}$  and  $T_{sub}$  at  $350^{\circ}\text{C}$  during 2 min; b) CdS film treated by methanol solution of the  $\text{CdCl}_2$  at 0.5 wt. % and after it heated at  $500^{\circ}\text{C}$  for 15 min in the air.

In both figures (1a and 1b), the highest values of  $R_a$  correspond to the closure of the central region where is located in the thermocouple and near the electrodes, which is the less hot region. As a result, surface roughness inhomogeneity are observed. In order to prevent the tip from being broken, the center of scanning area is set at the point of  $260 \mu\text{m}$  away from the center in the horizontal direction.

However, the  $R_a$  values of the center and the border of the films decreased by  $\text{CdCl}_2$  treatment, which reduced the largest  $R_a$  values and incremented the smaller ones, producing a slight tendency to homogeneity of the surface. This result indicated that the  $\text{CdCl}_2$  treatment provoked a decreasing of the surface roughness. The process of the recrystallization

and the improvement of the structural perfection and quality of CdS polycrystalline films with the  $\text{CdCl}_2$  treatment have recently been reported by others [19, 22, 23].

### III.2. Effect of the Substrate temperature on the roughness parameter

Figure 2 shows AFM micrographs of the as grown and  $\text{CdCl}_2$ -treated CdS films. CdS thin films were grown varying  $T_{Sub}$  at 200, 300 and  $350^{\circ}\text{C}$ . After  $\text{CdCl}_2$  treatment, the films were heated at  $500^{\circ}\text{C}$  for 15 min in the air. The micrograph of the as grown CdS film shows small grains on the surface. Several authors have demonstrated the effects of source and substrate temperature, ambient gas pressure and the separation between source and substrate in CSS on surface morphology of the films [24–26]. In this work, the AFM micrographs as grown CdS films and after treatment with  $\text{CdCl}_2$  indicate a progressive reduction in grain size with the substrate temperature. After  $\text{CdCl}_2$  treatment, a significant change in the grain size of the CdS film was observed. The film showed large grains and a densely packed morphology. Apparently, the small grains grew by moving the grain boundaries to form large grains by effect of the  $\text{CdCl}_2$ . These results are known, and it has been reported by various authors [20, 27].

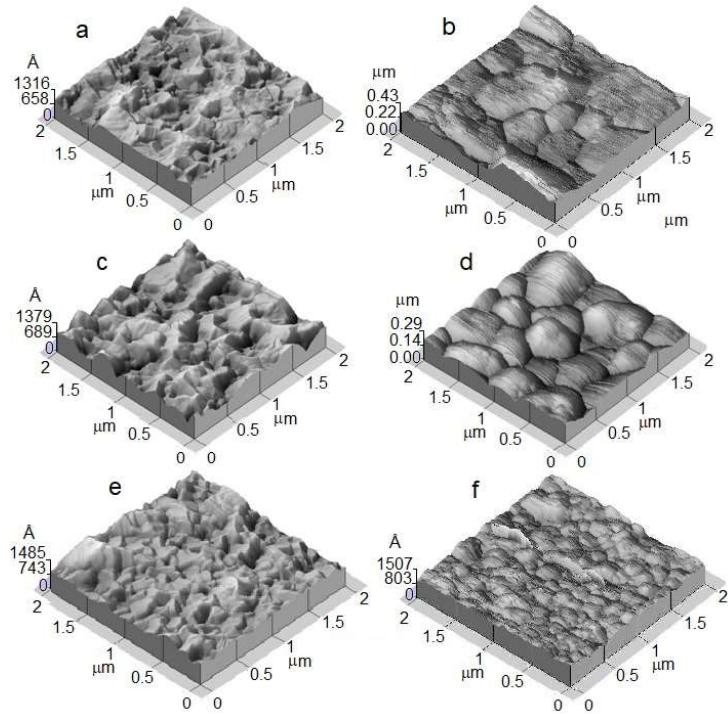


Figure 2. AFM micrographs of the CdS films grown at  $T_{Sour}$  at  $650^{\circ}\text{C}$  and  $T_{sub}$  varied at 200, 300 and  $350^{\circ}\text{C}$  during 2 min, without (a,c,e) and with  $\text{CdCl}_2$  treatment by methanol solution of the  $\text{CdCl}_2$  at 0.5 wt. % and after heating substrates at  $500^{\circ}\text{C}$  for 15 min in the air(b,d,f)

The changes on surface morphology produced by substrate temperature are quantified with roughness parameters for as grown CdS films and treated by the  $\text{CdCl}_2$ . Table III.2 showed

drastic variation of these parameters, where can observe one abrupt reduction of the  $Z$ ,  $Ra$  and  $RMS$  occurred with the increasing of the substrate temperature. In conclusion, the substrate temperature provoked the decreasing of the surface roughness. This behavior could be justified taking into account the strong temperature dependent of the mobilities of grain boundaries and rate of grain growth. Both factors can be used to control grain growth in films.

A comparative analysis between the roughness parameters of the as grown CdS thin films and treated by  $CdCl_2$  at  $350^\circ C$  demonstrate that there was a slight effect of the  $CdCl_2$  treatment on surface morphology. The small grains observed on the surface treated by  $CdCl_2$  could indicate the beginning of the recrystallization process. This suggests that higher temperature of treatment are needed to increasing of the recrystallization. This behavior has been seen in CdTe films grown by CSS and treated by  $CdCl_2$ , where the films do not show changes on surface with high substrate and treatment temperatures. [28, 29].

Table 1. Surface roughness parameters for as grown CdS films (at  $T_{Sour}$  at  $650^\circ C$  varying  $T_{Sub}$  at 200, 300 and  $350^\circ C$  during 2 min) and with  $CdCl_2$  treatment (0.5 wt %  $CdCl_2$  in methanol and after it heated at  $500^\circ C$  for 15 min in the air).

(textbf{t}_{Sub}^\circ C)	as grown CdS			$CdCl_2$ treatment		
	Z nm	$Ra$ nm	$RMS$ nm	Z nm	$Ra$ nm	$RMS$ nm
200	313 ± 12	104 ± 4	154 ± 6	134 ± 5	43.0 ± 1.6	58.1 ± 2.3
300	131 ± 5	35.4 ± 1.3	37.6 ± 1.4	103 ± 4	31.8 ± 1.4	38.5 ± 1.5
350	36.8 ± 1.5	8.8 ± 0.3	9.2 ± 0.2	34.8 ± 1.2	7.2 ± 0.3	10.6 ± 0.5

### III.3. Effect of the heat treatment times after $CdCl_2$ treatment

Many works from different research groups on CdTe solar cell have reported the effect of  $CdCl_2$  heat treatment, but very few are available on the importance of time evolution to the post- $CdCl_2$  heat treatment [30, 31]. In this subsection, the impact of the heat treatment times on the structural and morphological of CdS thin films has been explored using a  $CdCl_2$  heat treatment at vacuum with varying treatment times and followed by similar heat treatment at air to those used in the subsection (ii).

Figure 3 shows the AFM micrograph of as grown CdS films at  $T_{Sour}=650^\circ C$  and  $T_{Sub}=450^\circ C$  during 2 min and after treated by 0.5 wt %  $CdCl_2$  in methanol. The films treated by  $CdCl_2$  were heating in the reaction chamber at  $T=300^\circ C$  at  $10^{-5}$  Torr using variable times of the 1, 2 and 4 min. After, these films were heated at  $500^\circ C$  for 15 min in the air. The included histogram of the Figure 3 represent height distributions for vacuum heat times at 1, 2 and 4 min.

The micrograph of the as grown CdS film at  $T_{Sub}=450^\circ C$  showed a very irregular surface (see Figure 3). The roughness parameters of this surface are  $Z=31.71$  nm,  $Ra=7.01$  nm and  $RMS=9.3$  nm, being slightly lower values than those reported in Table III.2.

Table III.3 parameters gives the quantification of the roughness parameters for each vacuum heat treatment times. For all times, the surface roughness for treated films are higher than without treatment. The parameters  $Z$ ,  $Ra$  and  $RMS$ ,  $S_{ku}$  and  $S_{sk}$  were influenced by the vacuum heat treatment times. The  $S_{sk}$  parameter is close to zero at 2 min indicating the most symmetric peak distribution, while that  $S_{ku}$  parameter is major than 3 suggesting broadened height distributions. The histograms of Figure 3 confirmed these behaviors.

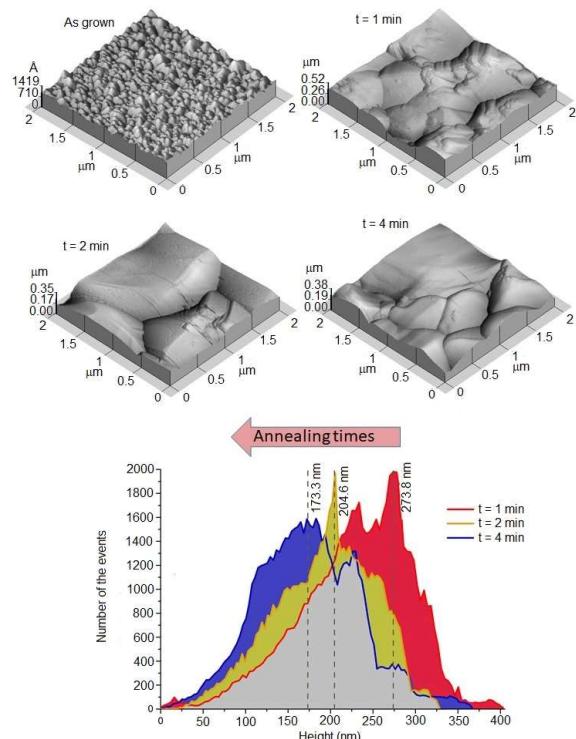


Figure 3. AFM micrographs of the CdS treated by 0.5 wt %  $CdCl_2$  in methanol. After the treated films were heated in the reaction chamber at  $T_{Sub}=300^\circ C$  at  $10^{-5}$  Torr using treatment times (1, 2 and 4 min) and following a heat treatment at  $500^\circ C$  for 15 min in the air. Height distributions correspond at 1, 2 and 4 min

The combination of the heat treatment in the reaction chamber at  $T=300^\circ C$  at  $10^{-5}$  Torr with variable times and at  $500^\circ C$  for 15 min in the air modified the surface morphology provoking a drastic increasing of the roughness parameters with respect to heat treatment only in air (see Table III.2). The heat treatment avoided the impurities from air which can affect the film structure basically the grain growth. Although it is difficult to isolate it from the effects of oxygen it seems clear that  $CdCl_2$  treatment is the effect dominant in the increasing of the roughness parameters [32, 33]. Nevertheless, the application of  $CdCl_2$  heat treatment in the presence of oxygen is a fact that achieves the highest efficiencies of CdTe solar cell [34].

Table III.3 shows that as the vacuum heat treatment times starts rising, the parameters  $Z$ ,  $Ra$  and  $RMS$ , decrease, and they start get up again while the times increases, being the highest values of  $Z$ ,  $Ra$  and  $RMS$  for 1 min and the minimum value for 2 min. We correlated these results with a recrystallization process. Recrystallization consists of nucleation and growth of a new crystalline structure, with lower strain energy, at the

expense of the original crystalline structure, and is generally followed by grain growth. The driving force for this process is the high stored energy present in the crystal defects. The condition for the occurrence of the recrystallization is the favorable energy balance between the decreasing of stored energy due to the elimination of defects (rearrangement and annihilation of crystal defects) caused by the passage of the boundary and the increasing of the total grain boundary energy [35].

Table 2. Surface roughness parameters for CdS thin films treated by 0.5 wt % CdCl<sub>2</sub> in methanol, heated in the reaction chamber at 300°C at 10<sup>-5</sup>Torr with vacuum heat treatment times: 1, 2 and 4 min; and following a heat treatment at 500°C for 15 min in the air.

times min	Z nm	R <sub>a</sub> nm	RMS nm	R <sub>p-v</sub> nm	S <sub>sk</sub> nm	S <sub>ku</sub> nm
1	403 ± 16	64.8 ± 2.6	51.7 ± 1.8	232 ± 9	-0.4431	3.5394
2	331 ± 13	58.0 ± 2.3	47.2 ± 1.7	195 ± 8	-0.0362	2.443
4	359 ± 14	60.3 ± 2.4	48.2 ± 1.7	175 ± 7	0.3789	2.6787

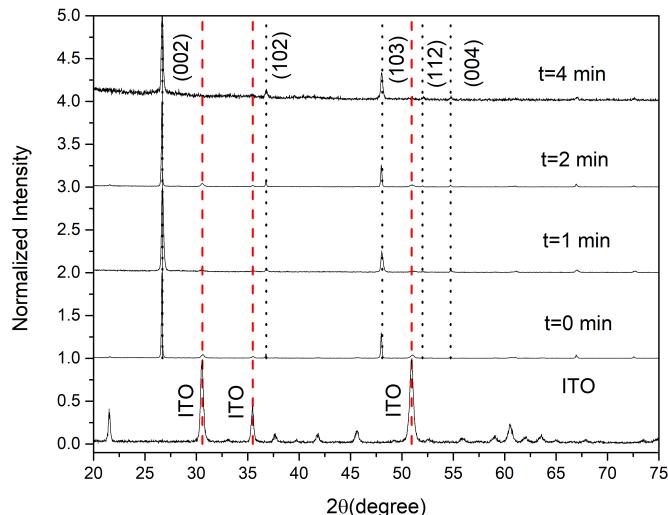


Figure 4. XRD of ITO substrate, the as grown CdS films and treated by 0.5 wt % CdCl<sub>2</sub> in methanol heated in the reaction chamber at 300°C at 10<sup>-5</sup>Torr using times (1, 2 and 4 min) and following a heat treatment at 500°C for 15 min in the air.

During the CdCl<sub>2</sub> vacuum heat treatment, there was an increase of stored energy in the crystal defects with time due to the chlorine incorporates into CdS films [36, 37]. We suggest that the mechanism of the recrystallization could be different for each time. For 1 min, the mechanism could take into account as major effect the migration of a pre-existing grain boundary toward the interior of a more highly strained grain and adsorbs stored energy from the local disorderliness created by chlorine. For 2 min, the number of defects must increase with respect to 1 min, in this manner, the crystal defects are surrounded by boundaries provoking grains sub-division, which could be interpreted as a new nucleation center. For 4 min, the grain should be capable of growing at the expense of its neighbors by thermally assisted grain boundary migration. In this way, a decrease in stored energy will occur during heat treatment due to the removal and rearrangement

of microstructural defects increasing energy and mobility of the grain boundaries.

Figure 4 displays the XRD patterns of ITO substrate, the as grown CdS films and treated by CdCl<sub>2</sub> for 1, 2, and 4 min. The reflections detected reveal that all samples crystallize in the hexagonal structure for polycrystalline CdS [38]. The most intense peak corresponded to the crystalline plane (002) at 26.7°.

The crystallite size of each pattern was estimated using the Williamson–Hall method [39]. The crystalline silicon has been used as a standard reference material for position calibration and instrumental broadening calculation. The full width at half maximum (FWHM) of the peaks (002), (102), (103) and (112) were estimated using the Voigt nonlinear curve fitting function, which gives the best fit for the experimental data. Table III.3 shows 2θ, FWHM, the crystallite size for each vacuum heat treatment time. It clearly displays that the behavior of the crystallite size is very similar to that of Z, Ra and RMS (see Table III.3). The highest values of crystallite size is observed for 1 min and the minimum value for 2 min. This confirmed the assumption that changes of the microstructural defects is correlated with the roughness.

Table 3. 2θ, FWHM, crystallite size for the CdS films grown at T<sub>Surf</sub>=650°C and T<sub>Sub</sub>=450°C during 2 min and after treated by 0.5 wt % CdCl<sub>2</sub> in methanol heated in the reaction chamber at 300°C at 10<sup>-5</sup>Torr using treatment times (1, 2 and 4 min) and following a heat treatment at 500°C for 15 min in the air.

Treatment times (min)	2θ (°)	FWHM (°)	crystallite size (nm)
1	26.703±0.001 36.832±0.008 48.078±0.006 51.102±0.019	0.203±0.003 0.309±0.122 0.180±0.006 0.506±1.225	40.98±0.11
2	26.619±0.011 36.764±0.005 48.004±0.004 50.989±0.007	0.091±0.003 0.078±0.005 0.099±0.002 0.335±0.028	9.36±0.05
4	26.674±0.002 36.812±0.013 48.049±0.005 52.088±0.053	0.398±0.003 0.170±0.017 0.157±0.002 0.228±0.164	21.52±0.21

The highest value of the crystallite size is reached by the untreated CdS film, which is of 89.58 ± 0.21 nm. This microstructure should help the recrystallization processes and grain growth.

Figure 5 illustrates the relationship between the RMS and crystallite size with vacuum heat treatment times. The minimum crystalline size was of 9.36 nm, which corresponded to the lowest value of the RMS, which was of 47.2 nm at 2 min. For this heating time, we have hypothesized that the mobility of grain boundaries is unable to eliminate totally the defects produced by the incorporation of Cl in the films and consequently occurred the division of the grains due to that the grain boundaries surrounding such defects. At 1 min, the highest value of the size crystallite is achieved at 40.98 nm consistent with the more value of the RMS of the 51.7 nm. In this case, the recrystallization mechanism takes into account the migration of a pre-existing grain boundaries toward the

neighbor grains (see the micrograph of as grown in Figure 5). At 4 min, the crystalline size increased at 21.52 nm while RMS was 48.2 nm. When increasing time until 4 min, increasing energy and mobility of the grain boundaries at the expense of removing and rearrangement of microstructural defects.

The mechanisms of recrystallization changed according to the vacuum heat treatment times. The dominant mechanism depended on the mobility and energy of the grain boundaries and the number of microstructural defects existing in the films. Thus, in some cases the movement of the pre-existing grain boundaries prevailed over the number of defects and in others the number of defects generated nuclei of recrystallization.

The recrystallization process is a function of temperature, treatment time, and initial crystal defects in the film. We concluded that CdCl<sub>2</sub> was the decisive factor for this process to happen, and hypothesized that the mechanism responsible for the increase in defects in the films, which triggered the recrystallization, was the incorporation of Cl during the treatment.

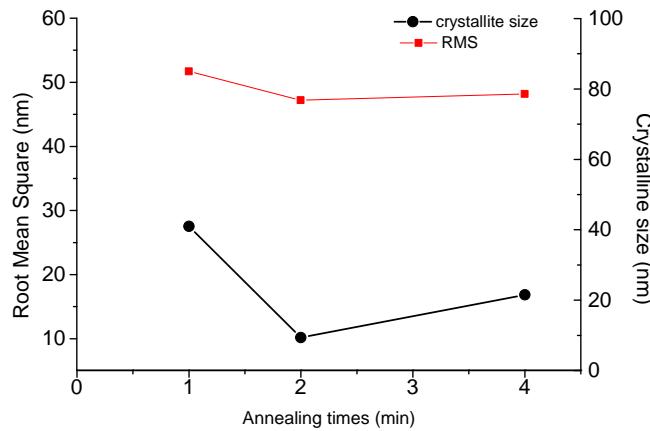


Figure 5. Dependence of the crystallite size, and RMS roughness determined by AFM on the treatment times. (The red line+square symbol correspond to RMS and black line+circle to crystallite size).

#### IV. CONCLUSIONS

Atomic force microscopy (AFM) was employed to monitor surface morphology of CdS thin films prepared on ITO substrates by CSS method and after treated by CdCl<sub>2</sub>. Based on these results, roughness parameters can lead to a better understanding of recrystallization mechanisms. We have shown the applicability of roughness parameters to describe the effects of the technological process on the surface. We know that our experimental results, based on the recrystallization provoked by CdCl<sub>2</sub> treatment, are very similar to those reported by others authors. However, the use of roughness parameters as described in this work could be another option to provides a more comprehensive understanding of the influence of the obtaining conditions on morphological features of the films and could help in tailoring the deposition parameters according to surface morphology requirements for an optoelectronic device applications.

This investigation demonstrated that the roughness parameters can be used to quantify the macroscopic changes

that occur on a surface, which are strongly linked with recrystallization processes. The temperature dependence of the growth grain size, the microstructure and the mobility of the border grain can be visualized through the roughness parameters. However, microscopic observations provided evidence that surface roughening of a polycrystalline material is a highly complex process and results from multiple mechanisms. Thus, any prediction about mechanisms or properties of the surface based on the roughness parameters should be carefully planned.

#### V. ACKNOWLEDGMENTS

We acknowledge funding support from the Programa Nacional de Ciencias Básicas y Naturales (project code PN223LH010-011).

#### VI. APPENDIX

Roughness Average ( $R_a$ ) used to evaluate the surface roughness, it is described according to:

$$R_a = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N |Z_i - \bar{Z}|, \quad (1)$$

$$\bar{Z} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Z_i \quad (2)$$

Where  $Z_i$  is the function that describes the surface profile analyzed in terms of height and position of the sample over the evaluation area.

The RMS roughness of a surface is similar to the roughness average, with the only difference being the mean squared absolute values of surface roughness profile. The function RMS is defined as:

$$RMS = \frac{1}{N} \left( \sum_{n=1}^N (Z_i - \bar{Z})^2 \right)^{1/2} \quad (3)$$

The RMS is more sensitive to peaks and valleys than the average roughness due to the squaring of the amplitude in its calculation.

Maximum height of the profile,  $R_{p-v}$ , is defined as the vertical distance between the deepest valley  $R_v$  and highest peak  $R_p$ .

$$R_{p-v} = R_p - R_v \quad (4)$$

The Skewness ( $S_{sk}$ ) parameter, which is a 3rd order statistical parameter, used to describe how symmetric a statistical distribution is (namely, when a statistical distribution have  $S_{sk}$  values close to zero, we have an almost perfect symmetric height distribution, in other words an almost perfect Gaussian distribution).

The Kurtosis ( $S_{ku}$ ) parameter, a 4th order statistical parameter used to describe how sharp or how broad a statistical distribution is. Small values of  $S_{ku}$  (around value 3) indicate broader height distributions, while values much higher than 3 indicate sharper distributions of peaks on the film surface.

## REFERENCES

- [1] P. Pfeifer, *Appl. Surf. Sci.* **18**, 146 (1984).
- [2] B. Bhushan, *Handbook Modern Tribology*, (CRC Press, 2001).
- [3] E. S. Gadelmawla, M. M. Koura, T. M. A. Maksoud, I. M. Elewa and H. H. Soliman, *J. Mater. Process. Technol.* **123**, 133 (2002).
- [4] B. B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature*, (San Francisco, CA, 1983).
- [5] F. Family, and T. Vicsek, *Dynamics of fractal surfaces*, (World Scientific, 1991).
- [6] I. Gupta and B. Ch. Mohanty, *Sci. Rep.* **6**, 1 (2016).
- [7] F. Grigoriev, V. Sulimov and A. Tikhonravov, *Adv. Opt. Mater.* **7**, 13 (2018).
- [8] M. P. Hernández, C. F. and Alonso, A. Martel, and E. Casielles, and V. Rejón, and J. L. Peña, *Phys. Stat. Sol. (b)* **220**, 209 (2000).
- [9] B. Bouaouina, A. Besnard, S. E. Abaidia, A. Airoudj and F. Bensouici, *Surf. Coat. Tech.* **333**, 32 (2018).
- [10] A. Drygała, L. A. Dobrzański, M. Szindler, M. M. Szindler, and M. Prokopiuk vel Prokopowicz, E. Jonda, *Int. J. Hydrogen Energ.* **41**, 7563 (2016).
- [11] N. A. Jahan, Md. Minhaz, U. Karim and M. M. Hossain, *Adv. Sci. Technol. Eng. Syst. J.* **3**, 213 (2018).
- [12] G. Kartopu, A. L. Williams, V. Zardetto, A. K. Gürleka, J. Clayton, S. Jones, W. M. M. Kessels, M. Creatore and S. J. C. Irvine, *Solar Energy Mater. Solar Cells* **91**, 78 (2019).
- [13] R. Kanmani, N. A. M. Zainuddin, M. F. M. Rusdi, S. W. Harun, K. Ahmed, I. S. Amiri and R. Zakaria, *Opt. Fiber Technol.* **50**, 183 (2019).
- [14] T. Begou, F. Lemarchand and J. Lumeau, *Opt. Express.* **24**, 20925 (2016).
- [15] P. K. Mochahari, F. Singh, and K. C. Sarma, *J. Mater. Sci.: Mater.* **29**, 582 (2018).
- [16] N. Saxena, P. Kumar, V. Gupta and D. Kanjilal, *J. Mater. Sci.: Mater.* **29**, 11013 (2018).
- [17] H. Y. R. Atapattu, D. S. M. De Silva, A. A. Ojo and I. M. Dharmadasa, *Fabrication of CdS/CdTe Thin Film Solar Cells via the Technique of Electrodeposition, (Development of Solar Power Generation and Energy Harvesting*, 2018).
- [18] B. E. McCandless, L. V. Moulton and R. W. Birkmire, *Prog. Photovolt. Res. Appl.* **5**, 249 (1997).
- [19] Z. C. Feng, C. C. Wei, A. T. S. Wee, A. Rohatgi and W. Lu, *Thin Solid Films* **518**, 7199 (2010).
- [20] L. Wan, Z. Bai, Z. Hou, D. Wang, H. Sun and L. Xiong, *Thin Solid Films* **518**, 6858 (2010).
- [21] I. Horcas, R. Fernández, J. M. Gómez Rodríguez, J. Colchero, J. Gómez Herrero and A. M. Baro, *Rev. Sci. Inst.* **78**, 013705 (2007).
- [22] S. Chander and M. S. Dhaka, *Mater. Res. Bull.* **97**, 128 (2018).
- [23] R. Yang, D. Wang, L. Wan and D. Wang, *Rsc Adv.* **4**, 22162 (2014).
- [24] S. N. Alamri, *Phys. Stat. Sol. (a)* **200**, 352 (2003).
- [25] J. Schaffner, E. Feldmeier, A. Swirschuk, H. J. Schimper, A. Klein and W. Jaegermann, *Thin Solid Films* **519**, 7556 (2011).
- [26] C. Doroody, K. S. Rahman, S. F. Abdullah, M. N. Harif, H. N. Rosly, S. K. Tiong, N. Amin, *Results Phys.* **18**, 103213 (2020).
- [27] M. Kim, S. Sohn, S. Lee, *Solar Energy Mater. Solar Cells* **95**, 2295 (2011).
- [28] H. R. Moutinho, R. G. Dhore, M. M. Al-Jassim, D. H. Levi, and L. L. Kazmerski, *J. Vac. Sci. Technol. A* **17**, 1793 (1999).
- [29] J. Quadros, A. L. Pinto, H. R. Moutinho, R. G. Dhore and L. R. Cruz, *J. Mater. Sci.* **43**, 573 (2007).
- [30] S. Chander, M. S. Dhaka, *Solar Energy* **150**, 577 (2017).
- [31] L. Vaillant, N. Armani, L. Nasi, G. Salviati, A. Bosio, S. Mazzamuto, N. Romeo, *Thin Solid Films* **516**, 7075 (2008).
- [32] W. S. Mohamed, M. F. Hasaneen and E. K. Shokr, *Mater. Res. Express* **4**, 046406 (2017).
- [33] M. F. Hasaneen, and W. S. Mohamed, *Optik* **160**, 307 (2018).
- [34] I. M. Dharmadasa, *Coatings* **4**, 282 (2014).
- [35] P. R. Rios, F. Siciliano Jr, H. R. Zschommler Sandim, R. L. Plaut, and A. F. Padilha, *Mater. Res.* **8**, 225 (2005).
- [36] T. Sivaraman, V. Narasimman, V. S. Nagarethinam and A. R. Balu, *Prog. Nat. Sci.-Mater.* **25**, 392 (2015).
- [37] J. D. Major, *Semicond. Sci. Technol.* **31**, 093001 (2016).
- [38] PDF-ICDD, PCPDFWin Version, International Center for Diffraction Data, ICDD, 2002.
- [39] G. K. Williamson and W. H. Hall, *Acta Metall.* **1**, 22 (1953).

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.



# ENSEÑANZA DE MÉTODOS NUMÉRICOS A TRAVÉS DE UNA HERRAMIENTA DIDÁCTICA BASADA EN ARDUINO: EL MECANISMO DE LAS 4 BARRAS REVISITADO

## TEACHING NUMERICAL METHODS THROUGH A DIDACTIC ARDUINO-BASED TOOL; THE 4-BAR LINKAGE CASE REVISITED

E. SERRANO-PÉREZ<sup>†</sup>

UNITEC MÉXICO - Campus Atizapán, Universidad Tecnológica de México, Boulevard Calacoaya 7, Capistrano, Cd. Adolfo López Mateos, Estado de México, México, 52970; edgar.serrano@my.unitec.edu.mx<sup>†</sup>

<sup>†</sup> autor para la correspondencia

Recibido 24/4/2020; Aceptado 4/3/2021

In this work, an educational tool for teaching numerical bisection and secant methods through its hardware implementation with an Arduino Due based card is presented. It is an accessible practice for the university level in which students who are not familiar with the programming languages can learn both numerical methods and the Arduino programming language due to its accessibility and simplicity. To verify results and as a means of debugging programs in the Arduino language, a spreadsheet is also used. As a case study, the classic problem of the 4-bar mechanism is revisited from a technological perspective, using a 32-bit microcontroller as a calculation tool. It is expected that development of traditional practices which are reviewed from a technological approach applied to real case studies, will encourage students to develop new prototypes and tangible technological developments by using the software and hardware tools to implement algorithms of numerical methods that solve complex engineering and physics problems.

En el presente trabajo se presenta una herramienta educativa para la enseñanza de los métodos numéricos de biseción y secante a través de su implementación en hardware con una tarjeta basada en Arduino Due. Se trata de una práctica accesible para nivel universitario en la cual los estudiantes que no se encuentran familiarizados con los lenguajes de programación pueden aprender paralelamente métodos numéricos y el lenguaje Arduino dado su accesibilidad y sencillez. Para verificar resultados y como un medio de depuración de los programas en lenguaje Arduino además se utilizó una hoja de cálculo. Como caso de estudio se revisita el problema clásico del mecanismo de 4 barras desde una perspectiva tecnológica, al utilizar un microcontrolador de 32 bits como herramienta de cálculo. Se espera que el desarrollo de prácticas tradicionales que revisitadas desde un enfoque tecnológico aplicado a casos de estudio reales, incentive a los estudiantes a desarrollar nuevos prototipos y desarrollos tecnológicos tangibles al contar con las herramientas de software y hardware para implementar algoritmos de métodos numéricos que resuelvan problemas complejos de física e ingeniería.

PACS: Computer use in laboratory (uso de la computadora en el laboratorio), 01.50.Lc; laboratory experiments and apparatus (experimentos y aparatos de laboratorio laboratorio), 01.50.Pa; demonstration experiments in physics education (experimentos demostrativos en la enseñanza de la física), 01.50.My.

La materia de métodos numéricos forma parte de las asignaturas de tronco común para la mayoría de los planes de estudio de universidades e institutos de formación superior, principalmente en las áreas de ingeniería. Los métodos numéricos son considerados como una herramienta esencial para el estudio del comportamiento de fenómenos físicos complejos, utilizando modelos matemáticos que permiten obtener soluciones de manera aproximada. Como una guía para los alumnos se han publicado diversas obras para ser tomadas como referencia en el área, sin embargo en su mayoría se percibe que fueron escritos por profesores de matemáticas, por lo que hay pocos casos de estudio que se enfocan y aplican en el mundo real [1]. Aunque es posible dictar el curso a través del uso de papel y calculadora, el esfuerzo de los estudiantes se incrementa toda vez que deben ser cuidadosos con las operaciones que realizan de forma manual [2]. Se debe recalcar que el verdadero potencial de los métodos numéricos se alcanza al ser implementados en sistemas de cómputo [3], los cuales tienen la capacidad de automatizar

los procesos hasta alcanzar una determinada condición, por ejemplo, la obtención de un error relativo asociado a una solución válida del problema. Considerando que en ocasiones alumnos de diferentes carreras de Ingeniería Mecánica, Civil, Electrónica, Ambiental y Química entre otras, acuden a un curso común, el uso de hojas de cálculo ha mostrado ser una herramienta útil para implementar métodos numéricos durante el proceso de enseñanza y aprendizaje [3], [4]. La mayoría de los estudiantes ya se encuentran familiarizados con el uso de hojas de cálculo, fundamentalmente con el uso de la función de arrastre que permite automatizar los procesos de cálculo en filas y columnas. Este conocimiento previo, es de gran ayuda para los estudiantes al implementar métodos numéricos usando la hoja de cálculo. Se ha observado que la implementación de los métodos numéricos en otros lenguajes de programación consume un mayor tiempo y esfuerzo. En algunos casos, los estudiantes se enfocan en el aprendizaje de los distintos lenguajes de programación para su implementación [1], [2], [4]. La situación se acentúa para

aquellos que han tenido poca o nula instrucción previa en el área de programación.

Considerando que se debe fomentar el desarrollo de las destrezas y nuevas habilidades de los estudiantes de distintas áreas para afrontar su futuro profesional, se ha propuesto un proyecto que fomenta la implementación de los algoritmos de bisección y secante en lenguaje Arduino. Recientemente se ha reportado el análisis de temas como interpolación, diferenciación e integración numérica utilizando la plataforma Arduino [5]. Se encontró que el estudio de problemas reales utilizando hardware de bajo costo, motiva el aprendizaje de los estudiantes. En este sentido, el objetivo de este trabajo se centra en promover el uso de hardware accesible, que permita estimular e incentivar el aprendizaje de métodos numéricos para aproximar la raíz de una ecuación: el método de bisección y la secante.

La implementación se realiza utilizando hardware accesible y de bajo costo, retomando como caso de estudio el mecanismo clásico de las 4 barras [6]. La propuesta tiene la intención de que en un futuro próximo, los estudiantes puedan desarrollar prototipos y desarrollos tecnológicos tangibles, que den solución a los problemas de distintas áreas de la física e ingeniería a través del uso de los métodos numéricos. Para este trabajo, se han considerado los múltiples beneficios observados al utilizar Arduino como una herramienta de aprendizaje [7]. Por su parte, la tarjeta Raspberry Pi ha mostrado su potencial como herramienta educativa; se ha reportado la implementación de métodos numéricos enfocados en resolver un problema tradicional, como lo es la carga y descarga de un circuito RC [8]. Para la implementación de esta propuesta, se ha decidido utilizar la tarjeta basada en Arduino Nano; considerando que tiene un precio más reducido y el lenguaje de programación simplificado basado en C, resulta amigable con los nuevos usuarios.

La exploración de problemas y experimentos clásicos de laboratorio física, utilizando dispositivos móviles y tarjetas educativas, se ha incrementado recientemente [9], [10]. Esto ha permitido abordar problemas tradicionales con un enfoque tecnológico; el uso de dispositivos digitales le brinda a los estudiantes una nueva perspectiva para el desarrollo de aplicaciones tangibles en el mundo real. Se espera que este tipo de experiencias durante su formación académica, promueva el desarrollo de dispositivos electrónicos que se comuniquen con teléfonos inteligentes, además de las herramientas de hardware disponibles, interconectadas a través del internet de las cosas. El desarrollo de dispositivos electrónicos debe enfocarse en solucionar los problemas de una sociedad cada vez más digitalizada.

En este trabajo, el caso de estudio analizado corresponde a la ecuación clásica de Freudenstein [6] para la síntesis del mecanismo de 4 barras, el cual ha sido utilizado como una ecuación modelo para el aprendizaje de diferentes métodos numéricos que obtienen la raíz de ecuaciones no lineales [11]. Se integra el componente tecnológico de hardware accesible y de bajo costo para la implementación de los algoritmos de bisección y secante en una tarjeta basada en Arduino Nano. El problema que se desea resolver a través del método

numérico implica aproximar el ángulo de Salida cuando se tiene un determinado ángulo de Entrada. Se retoman las longitudes de cada una de las 4 barras: 10, 8, 6 y 4 centímetros respectivamente. Mediante el software de diseño Sketchup en línea, se ha representado la situación del mecanismo de las 4 barras. El modelo en 2 dimensiones representa una geometría del mecanismo de 4 barras que define sus longitudes y ángulos, el resultado puede observarse en la Figura 1.

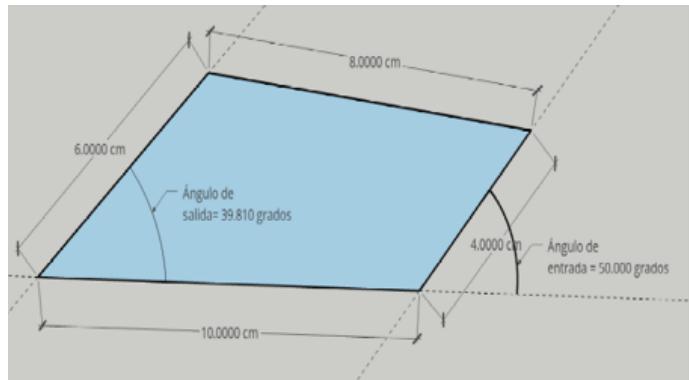


Figura 1. Representación en 2 dimensiones del mecanismo de las 4 barras.

La función de transportador integrada en el software Sketchup en línea, permite realizar la medición de ángulos directamente sobre la geometría; en este caso se aprecia que al tener un ángulo de entrada de  $50.000^\circ$ , se obtuvo una medición gráfica para el ángulo de salida de  $39.810^\circ$ . Se observa que a través del software de diseño en línea, es posible obtener un valor cercano a la solución analítica, lo cual le permite a los estudiantes tener una herramienta gráfica de verificación de resultados; considerando que la solución exacta del ángulo de salida es  $39.81040^\circ$  [11].

La ecuación simplificada que relaciona el ángulo de entrada y el ángulo de salida, tiene la siguiente forma [11]:

$$\frac{5}{3} \cos \alpha - \frac{5}{2} \cos \beta + \frac{11}{6} - \cos(\alpha - \beta) = 0 \quad (1)$$

Donde  $\alpha$  representa el ángulo de entrada y  $\beta$  representa el ángulo de salida. Se han implementado los métodos de bisección y secante en una tarjeta basada en Arduino Nano. Adicionalmente, como un medio de verificación y rastreo de resultados, se recomienda implementar ambos métodos en una hoja de cálculo. Los resultados obtenidos, al implementar el método de la bisección en la tarjeta basada en Arduino Nano, se observan en la Tabla .

Tabla 1. Implementación del algoritmo de Bisección en una tarjeta basada en Arduino Nano.

Iter	Raíz aprox.	Error Relativo porcentual
1	35.000000	
2	37.500000	6.666667 %
3	38.750000	3.225806 %
4	39.375000	1.587302 %
18	39.810447	0.000096 %
19	39.810428	0.000096 %

Para la implementación en lenguaje Arduino del método de la bisección, se consideró  $30^\circ$  y  $40^\circ$  como los límites inferior y superior del intervalo de búsqueda donde se encuentra la raíz. Tanto para el caso de la implementación del algoritmo de la bisección como de la secante, la definición de la función en lenguaje Arduino se hizo de la siguiente manera:

```
float f(float x)
{
return (1.666666)*cos(radians(50))-2.5*cos(radians(x))
+1.833333-cos(radians(50-x));
}
```

Se utilizaron números decimales, a fin de reducir el esfuerzo computacional de la tarjeta con microcontrolador; con esto, se evitó realizar las divisiones presentes de la ecuación simplificada del mecanismo de las 4 barras.

Tabla 2. Implementación del algoritmo de Secante en una tarjeta basada en Arduino Nano

Iter	Raíz aprox.	Error Relativo porcentual
1	39.769248	
2	39.810283	0.103076 %
3	39.810428	0.000364 %

La descripción del algoritmo de bisección y la secante, pueden consultarse en obra publicada [12]. Es posible observar que el método de bisección tiene la desventaja de una convergencia lenta, aunque se aproxima paulatinamente a la solución exacta. Para el método de la secante, el cual se prefiere a ser utilizado cuando es difícil obtener la derivada de la función con el método de Newton, los resultados se pueden consultar en la Tabla . Los dos puntos de aproximación para comenzar el método de la secante fueron  $30^\circ$  y  $40^\circ$ ; para este método no es necesario que dichos puntos encierran la raíz, como lo es en el caso del método de bisección.

Se observa que la convergencia del método de la secante para este caso es más rápida, además que no fue necesario obtener la derivada de la ecuación ni evaluarla durante el proceso de cálculo como lo requiere el método de Newton.

Se ha presentado la propuesta de un proyecto que revisita un problema clásico como el mecanismo de las 4 barras con un enfoque tecnológico, que le permite a los alumnos implementar algoritmos de métodos numéricos a través de hardware accesible. Esta propuesta tiene además la finalidad de que los alumnos aprendan paralelamente un lenguaje de programación simplificado e intuitivo basado en C, como lo es Arduino. Se fomenta el uso de una herramienta de diseño en 2 dimensiones, así como el uso de una hoja de cálculo,

para dotar a los alumnos con medios de verificación visual, que faciliten la depuración del algoritmo de programación, implementado en una tarjeta con microcontrolador. El trabajo presentado, favorece la vinculación entre el estudio teórico de los métodos numéricos para resolver problemas reales desde una perspectiva tecnológica. Se fomenta el uso de dispositivos electrónicos con la finalidad de volver más interesante y atractivo su análisis. En el tenor de este breve artículo, queda aún como un problema abierto, el desarrollo de una interfaz gráfica para el procesamiento de los datos obtenidos a través de la tarjeta con microcontrolador. Por otra parte, el desarrollo de un prototipo tangible y funcional que permita presentar a los alumnos el problema a resolver utilizando software y hardware accesible. En una etapa conceptual, se ha construido un modelo con láminas de madera comprimida, el cual consta de 4 barras unidas a través de tuercas y tornillos de metal, con la finalidad de otorgar movilidad al mecanismo. Para modificar el ángulo de entrada del mecanismo se ha acoplado un servomotor. Sin embargo, aspectos técnicos como la precisión y exactitud para medir y controlar los ángulos del mecanismo, aún son problemas abiertos por resolver y que se esperan presentar en una siguiente comunicación.

## REFERENCIAS

- [1] S. Fernández, J. A. Orosa, J. J. Galán, *JMR* **9**, 2 (2012).
- [2] H. Morarji, R. E. M. Cooper, R. L. Broughton, *Int. J. Math. Ed. Sci. Technol.* **11**, 33 (1980).
- [3] H. Djamilia, *J. Phys.: Conf. Ser.* **890**, 012093 (2017).
- [4] J. Mendonça, G. Gonçalves, T. Ferro, M. Ferreira, «Teaching and learning of contents from numerical methods using the technology: Comparison of the use of two technological resources», en 2016 International Symposium on Computers in Education (SIIE), (2016).
- [5] D. Herceg, D. Herceg, *Inform. Educ.*, **19**, 239 (2020).
- [6] F. Freudenstein, *Reson.* **15**, 740 (2010).
- [7] A. A. Galadima, «Arduino as a learning tool», 11th International Conference on Electronics, Computer and Computation (ICECCO), (2014).
- [8] W. S. M. Sanjaya, D. Anggraeni, A. Sambas, R. Denya, *J. Phys.: Conf. Ser.* **1090**, 012015 (2018).
- [9] V. L. Díaz-Melián et al., *Rev. Cubana Fis.* **36**, 4 (2019)
- [10] C. Calvo-Mola, S. López-Pérez, E. García-Alfonso, J. Cerutti-Torres, *Rev. Cubana Fis.* **36**, 125 (2019)
- [11] J. D. Hoffman, S. Frankel, *Numerical Methods for Engineers and Scientists*. CRC Press, 2018.
- [12] S. C. Chapra, R. P. Canale, *Numerical methods for engineers*, 6th ed. Boston: McGraw-Hill Higher Education, 2010.

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.



# ALTERNATIVE METHOD FOR THE PHYSICAL INTERPRETATION OF THE NUT SOLUTION

## MÉTODO ALTERNATIVO PARA LA INTERPRETACIÓN FÍSICA DE LA SOLUCIÓN NUT

L. A. LÓPEZ<sup>a</sup>, O. PEDRAZA<sup>a</sup>, V. E. CERON<sup>a</sup>, R. ARCEO<sup>b†</sup>

a) Área Académica de Matemáticas y Física, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Carretera Pachuca-Tulancingo Km. 4.5, C. P. 42184, Mineral de la Reforma, Hidalgo, México

b) Facultad de Ciencias en Física y Matemáticas, Universidad Autónoma de Chiapas, C. P. 29050, Tuxtla Gutiérrez, Chiapas, México; roberto.arceo@unach.mx<sup>t</sup>

† corresponding author

Recibido 15/2/2021; Aceptado 2/6/2021

An alternative analysis of the NUT solution's physical interpretation is carried out, using the rod structure method of axial-symmetric solutions in Weyl coordinates. We obtain that the NUT solution can be interpreted as two counter-rotating rods of infinite rotation and with identical masses and a central static rod of different mass.

Se realiza un análisis alternativo de la interpretación física de la solución NUT, por medio del método de la estructura de barras de soluciones axiales simétricas en coordenadas de Weyl. Obteniendo que la solución NUT se puede interpretar como dos barras contra rotantes de rotación infinita y con masas idénticas y una barra central estática de masa diferente.

PACS: Classical general relativity (relatividad general clásica), 04.20.-q; singularities and cosmic censorship (singularidades y sensores cósmicos) 04.20.Dw; exact solutions (soluciones exactas), 04.20.Jb

### I. INTRODUCTION

The Taub-NUT solution, first derived by Taub (1951) [1] and then by Newman et al. (1963) [2], has been the subject of intensive study due to its interesting properties. For example the NUT parameter contained in the solution has been related to the force of the gravomagnetic monopole, but its interpretation is under debate. The NUT solution is stationary, asymmetric, but not globally asymptotically flat because it has a semi-infinity singularity on the axis of symmetry at  $\theta = \pi$ . In [3] this singularity was interpreted as a semi-infinite massless source endowed with a finite angular momentum. The NUT solution has also been shown to be relevant in studies of black hole entropy for binary solutions [4,5].

In [6] proved that all geodesics of NUT space lie on spatial cones; this property also leads to gravitational lensing. In [7], the author proposes the construction of Skyrme fields; the procedure is implemented for Atiyah–Hitchin and Taub–NUT instantons. The NUT parameter has been implemented to study the stationary axial-symmetric space-time and nonlinear Born-Infeld electrodynamics [8].

A physical interpretation of the solution was given in [9], where they show that the NUT solution is interpreted as two counter-rotating semi-infinite sources of negative mass and infinite angular momentum, and between them a finite static source of positive mass. This study is carried out writing the solution in terms of the potentials of the Erns [10] and the integrals of Komar [11]. These techniques are widely used to obtain and analyze binary solutions.

Stationary axial-symmetric solutions can also be characterized by means of the rod structure, which provides information about the sources, which make up the complete source, and

can be an alternative method to give a physical interpretation of the solutions, as can be seen in [12] and [13], that is why it is proposed to make one of said method, to study the NUT metric, this in order for the reader to observe how to use the rod structure. Given that the physical interpretation has already been given in [9], it can be seen that when using the rod structure we obtain the same interpretation but with an alternative method and more simple. This type of solutions could serve as support material in some gravitation course and it can also be the starting point or motivation for the students interested in the area. This work can be useful to the scholars in the area of mathematical methods for gravitation.

In section II the stationary axial-symmetric Weyl metric is briefly explained, later in section III an analysis is made of the solution in order to be characterized by the rod structure. Then in section IV it is mentioned how to obtain the information of mass and angular momentum of the rod face that makes up the rod structure of the solution. In section V the behavior of the NUT metric is studied by analyzing the rod structure, obtaining that the behavior is similar to the one reported in [9]. Finally in VI general conclusions are given.

### II. WEYL'S METRIC

There are different ways to write the solutions of Einstein's equations in vacuum, depending on their symmetry; A stationary axial-symmetric solution can support two Killing vector fields  $V_1$  and  $V_2$ , that generate a group  $G_2$ , the group is an abelian group if the Killing vectors commute. Almost all known interesting four-dimensional solutions of Einstein equations in vacuum, electrovacuum, or with some fundamental matter fields belong to this class  $G_2$ , and are known as the  $G_2$  solutions. The line element of the  $G_2$  solutions

can be written in the form of Papapetrou (1966) [14],

$$ds^2 = e^{-2U}(g_{ab}dx^adx^b + \alpha^2d\phi^2) - e^{2U}(dt + Wd\phi)^2. \quad (1)$$

Where we consider the Killing vectors  $V_1 = \partial_t$  and  $V_2 = \partial_\phi$ , and the metric functions  $U$ ,  $g_{ab}$ ,  $W$  and  $\alpha$  depend only on the coordinates  $x^a = (x^1, x^2)$ . The isotropic coordinates are obtained from considering  $\alpha = \rho$ , they are known as Weyl coordinates ( $x^1 = \rho, x^2 = z$ ).

In 1917 Weyl [14] found a 4-dimensional (4D) static axial-symmetric ( $W = 0$ ) solution of Einstein's field equations in vacuum, which is given by:

$$ds^2 = -e^{2U}dt^2 + e^{-2U+2\sigma}(d\rho^2 + dz^2) + \rho^2e^{-2U}d\phi^2, \quad (2)$$

where  $\sigma(\rho, z)$  satisfies,

$$\partial_\rho\sigma = \rho[(\partial_\rho U)^2 - (\partial_z U)^2], \quad (3)$$

$$\partial_z\sigma = 2\rho(\partial_\rho U)(\partial_z U), \quad (4)$$

where  $U(\rho, z)$  is an arbitrary solution of Laplace's equation  $U_{,\rho\rho} + \frac{1}{\rho}U_{,\rho} + U_{,zz} = 0$ , in a three-dimensional flat space with metric:

$$ds^2 = d\rho^2 + \rho^2d\phi^2 + dz^2. \quad (5)$$

Since  $U(\rho, z)$  does not depend on  $\phi$ , it can be considered as an axial-symmetric potential, corresponding to a certain density of mass per unit length. For example, the Schwarzschild solution corresponds to taking the source for  $U$  to be a thin rod on the  $z$ -axis with mass  $1/2$  per unit length.

As the coordinates  $\rho$  and  $z$  can be chosen that span two-dimensional surfaces orthogonal to all the Killing vector fields  $\partial_{y^i}$  ( $y^i = (t, \phi)$ ) and then extended along the integral curves of said fields. In this coordinate system, the vectors  $\partial_\rho$  and  $\partial_z$  are orthogonal to  $\partial_{y^i}$ . If it is further assumed that the Killing vector fields are orthogonal to each other, then the metrics (1) and (2) can be written in compact form canonical (for reference see [5]) or in Weyl coordinates such as,

$$ds^2 = \sum_{i,j=1}^2 G_{ij}dy^idy^j + e^\sigma(d\rho^2 + dz^2), \quad (6)$$

with  $\rho = \sqrt{|\det(G_{ij})|}$ , where  $G_{ij}$  and  $\sigma$  are functions only of  $\rho$  and  $z$ . Considering Einstein's equations in vacuum  $R_{ab} = 0$ , we obtain that the equations for  $\sigma$  are,

$$\begin{aligned} \partial_\rho\sigma &= -\frac{1}{2\rho} + \frac{\rho}{8}\sum_{i,j,k,l=1}^2 G^{ij}G^{kl}\partial_\rho G_{ik}\partial_\rho G_{jl} \\ &\quad - \frac{\rho}{8}\sum_{i,j,k,l=1}^2 G^{ij}G^{kl}\partial_z G_{ik}\partial_z G_{jl}, \\ \partial_z\sigma &= \frac{\rho}{4}\sum_{i,j,k,l=1}^2 G^{ij}G^{kl}\partial_\rho G_{ik}\partial_z G_{jl}. \end{aligned} \quad (7)$$

### III. STATIONARY SOLUTION ANALYSIS

In the stationary solution (6) it can be analyzed as in [5],  $G_{ij} = G$  requires to be continuous; from the equation  $\det G = \rho^2$ , However, this breaks down as  $\rho \rightarrow 0$ , because for  $\rho = 0$  we have that  $\det G = 0$  so  $G$  is not invertible. Also it is observed that the product of the eigenvalues of  $G(\rho, z)$  goes to zero for  $\rho \rightarrow 0$ , the eigenvalues  $G(0, z)$  are real, being  $G$  symmetrical and include the zero eigenvalue.

A necessary condition for a regular solution is that precisely an eigenvalue of  $G(0, z)$  be zero for some given  $z$ . Briefly  $\dim(\ker G(0, z)) \geq 1$  except for isolated points denoted as  $a_1, a_2, a_3, \dots, a_N$  with  $a_1 < a_2 < a_3 < \dots < a_N$ . So the axis  $z$  is divided into intervals  $(-\infty, a_1), (a_1, a_2), \dots, (a_N, \infty)$  known as  $N + 1$  intervals or rods of the solution.

The solution  $G_{ij}$  has  $(N + 1)$  rods  $(a_{k-1}, a_k)$  with  $k = 1, 2, \dots, N + 1$ , defining for the solution  $G$ ,  $(N + 1)$  vectors  $v_k$  in  $\mathfrak{R}^2$  as,

$$G(0, z)v_k = 0 \quad \text{for } z \in (a_{k-1}, a_k), \quad k = 1, \dots, N + 1. \quad (8)$$

If  $v_k \neq 0$ , that is,  $v_k \in \text{Ker}[G(0, z)]$ ,  $v_k$  is called the direction of the corresponding rod  $(a_{k-1}, a_k)$ . The rod structure of the solution  $G$  is defined as the specification of the intervals  $(a_{k-1}, a_k)$  plus the corresponding directions  $v_k$  related with the Killing vectors  $V_1$  and  $V_2$ . Let us mention that  $v_k$  exists and is unique.

In general, the rods can be characterized as follows [15]:

- Finite rods located in the temporaloid direction  $\partial_t$  correspond to event horizons in space weather semi-infinite rods in  $\partial_t$  correspond to accelerated horizons.
- Rods located in the spacial directions  $\partial_\phi$  correspond to intervals in the orbit of  $\partial/\partial\phi$ ; if the rod is semi-infinite, then this set extends to infinity, corresponding to an axis of rotational symmetry with  $\phi$  acting as the azimuthal angle. The  $\phi$  must be identified with a certain period but it is related to conic singularities.

The rod structure provides a tool to analyze stationary solutions, although it is not possible to characterize to a solution due to its rod structure, since there can be different solutions that contain the same structure of rods. To give an unique characterization, in addition to the rod structure, it is necessary to impose conditions such as flat nod (see for example [16]).

### IV. MASS AND MOMENT ASSOCIATED WITH THE ROD STRUCTURE

To interpret the parameters found in the metric functions of the solution (6), we will follow the analysis of T. Harmark and P. Olesen [17]. For this, the following quantity is defined,

$$\vec{C}(\rho, z) = \vec{C} = G^{-1}\vec{\nabla}G, \quad (9)$$

where  $G(\rho, z)$  is given in (6) and (7). The components of the new element are:  $C_\rho = G^{-1}\partial_\rho G$  and  $C_z = G^{-1}\partial_z G$ , so (9), it complies with the equation  $\vec{\nabla} \cdot \vec{C} = 0$  for  $\rho > 0$ . In  $\rho = 0$ , we

can have sources and it is possible to determine a source if the following equation is fulfilled:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{C} = 4\pi\delta^2\rho(z). \quad (10)$$

The delta-function  $\delta^2$  expresses that we have sources for  $\vec{C}$  at  $\rho = 0$ . Since  $\vec{C}$  complies with Gauss's law-like equation (10).

Now we propose that  $\vec{C}$  (matrix  $2 \times 2$ ) as function a potential  $B(\rho, z)$  as;

$$C_\rho = -\frac{1}{\rho}\partial_z B(\rho, z); \quad C_z = -\frac{1}{\rho}\partial_\rho B(\rho, z). \quad (11)$$

When we consider a cylindrical volume  $V = (\rho \leq \rho_0, z_1 \leq z \leq z_2)$  and Gauss' law for  $\vec{C}$ :

$$\int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{C} dV = \int_S \vec{n} \cdot \vec{C} dS \quad (12)$$

we obtain that

$$-\int_0^{\rho_0} \partial_\rho B|_{z_1} d\rho + \int_0^{\rho_0} \partial_\rho B|_{z_2} d\rho - \int_{z_1}^{z_2} \partial_z B|_{\rho_0} dz = B(0, z_1) - B(0, z_2) \quad (13)$$

and perform an analysis, it is possible to obtain a matrix that represents the density of the system source, by means of  $\rho(z) = -\frac{1}{2}\partial_\rho B(0, z)$  or  $\rho(z) = \frac{1}{2}\lim_{\rho \rightarrow 0} \rho C_\rho$ ;

In the case the of solutions asymptotic to Minkowski space the behavior of  $B(\rho, z)$  (see the work of T. Harmark and P. Olesen [17]) are,

$$B_{11}(\rho, z) = -\frac{2Mz}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} \quad B_{12}(\rho, z) = \frac{2Jz(3\rho^2 + 2z^2)}{(\rho^2 + z^2)^{3/2}} \quad (14)$$

Being  $M$  the mass of the rod and  $J$  the angular momentum, with the help of (13),  $\rho(z)$  and the behavior of  $B(0, z)$  (14) we have,

$$2M = \int_{z_1}^{z_2} dz \rho_{11}(z), \quad -4J = \int_{z_1}^{z_2} dz \rho_{12}(z), \quad (15)$$

Thus, with the help of both matrices, it is possible to include all the information of the rods (direction, cut and density or mass) of the solution to be studied.

## V. NUT METRIC

The NUT metric in Weyl coordinates takes the form,

$$ds^2 = e^{-2U} [e^{2K} (d\rho^2 + dz^2) + \rho^2 d\phi^2] - e^{2U} (dt + Ad\phi)^2, \quad (16)$$

where

$$e^{2U} = \frac{(r_+ + r_-)^2 - 4(m^2 + l^2)}{(r_+ + r_- + 2m)^2 + 4l^2}; \quad A = \frac{l}{\sqrt{m^2 + l^2}} (r_+ - r_-), \quad (17)$$

where  $r_\pm^2 = \rho^2 + (z \pm a_0)^2$  with  $a_0 = \sqrt{m^2 + l^2}$ . Being  $m$  the parameter associated with the mass of the linear source and  $l$  the so-called NUT parameter.

Carrying out the analysis of the rod structure, we notice that the NUT metric has the form of the metric (6), so we have,

$$G(\rho, z) = \begin{pmatrix} -e^{2U} & -e^{2U}A \\ -e^{2U}A & \rho^2 e^{-2U} - e^{2U}A^2 \end{pmatrix}, \quad (18)$$

and in the  $\rho \rightarrow 0$

$$G(0, z) = \begin{pmatrix} -e^{2U_0} & -e^{2U_0}A_0 \\ -e^{2U_0}A_0 & -e^{2U_0}A_0^2 \end{pmatrix}. \quad (19)$$

As mentioned in the previous section, the values that divide the axis  $z (-\infty, \infty)$ , are those that do not comply with  $\dim(\ker G(0, z)) \geq 1$ , and in the case of NUT, it is easy to see that they are  $z = \pm a_0$ , since  $G(0, \pm a_0) = 0$ , so we will have the next rods  $(-\infty, -a_0), (-a_0, a_0), (a_0, \infty)$ .

### V.1. Rod Analysis $(-\infty, -a_0)$

If we consider values of  $z \in (-\infty, -a_0)$  we will have the following relationships  $z - a_0 < 0$  and  $z + a_0 < 0$ , which applying to the metric functions, we would have  $A_0 = \pm 2l$  and  $e^{2U_0} = \frac{z^2 - a_0^2}{(mz)^2 + l^2}$ , taking the equation (8),  $G(0, x)v_k = 0$ , with  $v_k = (v_t, v_\phi)$ . Carrying out the analysis, we obtain the relation  $v_t + \frac{A}{2}v_\phi = 0$ , so we can take  $v_t = 1$  and  $v_\phi = -\frac{2}{A_0}$ , that is, the rod  $(-\infty, -a_0)$  has address  $(v_t, v_\phi)$ .

### V.2. Rod Analysis $(-a_0, a_0)$

If we consider values of  $z \in (-a_0, a_0)$  we will have the following relationships  $z + a_0 > 0$  and  $z - a_0 < 0$ , that applying to the metric functions it is obtained that  $A_0^2 = \frac{l^2}{a_0^2} 4z^2$  and the element  $G_{\phi\phi} = (\rho^2 e^{2U} - e^{2U}A^2) \rightarrow -\frac{z^2 - a_0^2}{2a_0}$  in  $\rho \rightarrow 0$ . Carrying out the corresponding analysis, we have that the rod  $(-a_0, a_0)$  has an address only in  $v_t$ .

### V.3. Rod Analysis $(a_0, \infty)$

The analysis of the rod  $(a_0, \infty)$  is very similar to the rod  $(-\infty, -a_0)$ , in this case it is obtained that the rod also has the address  $v_k = (v_t, v_\phi)$ , but with  $v_t = 1$  and  $v_\phi = \frac{2}{A_0}$ .

As for the rod structure of the NUT solution, it can be visualized as in the figure (1). Where it is observed how the axis  $z$  is divided into intervals, each rod has a certain mass  $M_i$  and momentum  $J_i$ , it is also shown that in the case of the intervals  $(-\infty, -a_0)$  and  $(a_0, \infty)$  have two addresses  $\partial_t$  and  $\partial_\phi$ , which is represented by the dotted lines between the rods, and the arrow indicate that they are counter-rotating. Also, the figure (1) shows the directions of symmetry ( $\partial_t$  and  $\partial_\phi$ )

related to Killing vectors, where the rods or regions of the solution are represented.

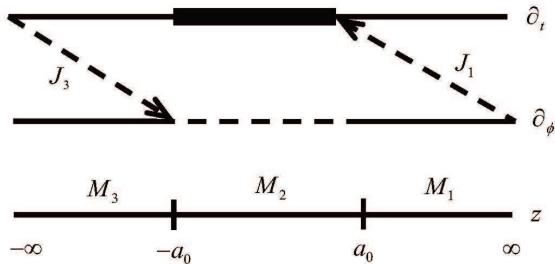


Figure 1. NUT metric rod structure showing directions  $\partial_t$  and  $\partial_\phi$ .

Finally the mass and angular momentum of each rod can be obtained using the equations (15), for the rod  $(a_0, \infty)$  it will be obtained,

$$2M_1 = \int_{a_0}^{\infty} \frac{2l^2(a_0^2 - z^2)}{(l^2 + (m+z)^2)^2} dz = m - \sqrt{l^2 + m^2}, \quad (20)$$

analyzing now the angular momentum we will have,

$$\begin{aligned} -4J_1 &= \int_{a_0}^t -\frac{4l[-2a_0^2l^2 + l^4 + (m+z)^4 + 2l^2(m^2 + 2mz + 2z^2)]}{[l^2 + (m+z)^2]^2} dz \\ &= \frac{4l(m+t)(l^2 + m^2 - t^2)}{l^2 + (m+t^2)}; \quad J_1 = \lim_{t \rightarrow \infty} lt. \end{aligned} \quad (21)$$

The same analysis is applied to the rod  $(-\infty, -a_0)$  obtaining that  $M_3 = M_1$  and  $J_3 = -J_1$ .

Now we analyze the rod  $(-a_0, a_0)$ , obtaining  $J_2 = 0$  and that the mass of the rod is  $M_2 = \sqrt{m^2 + l^2}$ . It is very easy to observe that from the sum of the masses of the three rods the mass of the linear source  $m$  is obtained, and that the solution has momentum  $J = 0$ . Remember that the rod structure is a way of observing behaviors of axial-symmetric solutions. What was obtained agrees with what was studied by V. S Manko and E. Ruiz [9], in this work they used another method, such as Komar integrals, obtaining the same information. In other words, the NUT solution can be physically interpreted as the model of two counter-rotating sources at the ends and a source in the center with static positive mass and semi-infinite rods with negative masses.

## VI. CONCLUSIONS

By studying the rod structure of the NUT solution in Weyl coordinates, it is possible to give an interpretation of its behavior. The NUT solution is interpreted as two infinite sources with opposite angular momenta, and negative mass and placed between them a finite static source with positive mass.

It is worth mentioning that the results obtained in this work are in agreement with the results obtained by V. S. Manko and

E. Ruiz [9], because we obtained the same two semi-infinite regions (rods) with opposite infinite angular momenta and negative masses, also between the semi-infinite regions there is a finite region (rod) with the same mass reported by V. S. Manko and E. Ruiz.

However, the rod structure method is easy and suitable to use to characterize symmetric axial solutions of Einstein's equations that are in Weyl coordinates, as in this case, it was possible to apply it to the NUT solution even though it is a complex solution to be interpreted. With the rods method, the Nut solution's analysis allows to determine the directions of symmetry where the rods or regions of the solution are found.

The intention of showing the application of the rod structure in this work is to provide alternative methods to interpret this type of solutions, and thus to have more tools to study and characterize solutions of Einstein's equations with axial symmetry.

## REFERENCES

- [1] A. H. Taub, Ann. Math. SB **53**, (1951).
- [2] E. Newman, L. Tamburino, T. Unti J. Math. Phys. **4**, 915 (1963).
- [3] W. B. Bonor, Proc. Cambridge Philos. Soc. **66**, (1969).
- [4] I. Cabrera-Munguia, C. Lammerzahl, L. A. López, A. Macías, Phys Rev. D **88**, 084062 (2013).
- [5] T. Harmark, Phys Rev. D **70**, 124002 (2004).
- [6] D. Lynden-Bell., M. Nouri-Zonoz., Rev. Mod. Phys. **70**, 427 (1998).
- [7] M. Dunajski, Proc. Roy. Soc. Lond. A **469**, 1471 (2013).
- [8] N. Bretón. C. E. Ramírez-Codiz, Annals Phys. **353**, 270 (2014).
- [9] V. S. Manko, E. Ruiz, Classical and Quantum Gravity **22**, (2005).
- [10] Erns, F. J., *New Formulation of the Axially Symmetric Gravitational Field Problem*, Phys. Rev. **167**, 1175 (1968).
- [11] A. Komar, Phys. Rev. **113**, 934 (1959).
- [12] N. Bretón, A. Feinstein, L. A. López, Phys Rev. D **77**, 124021 (2008).

- [13] L. A. López, N. Bretón, A. Feinstein, J. Mod. Phys. Lett. A **25**, 815 (2010).
- [14] H. Stephani, D. Kramer, M. MacCallum, C. Hoenselaers, E. Herlt, Cambridge University Press, Second Edition, (2003).
- [15] R. Emparan, H. S. Reall, Phys. Rev. D **65**, 084025 (2002).
- [16] S. Hollands, A. Ishibashi, R. M. Wald, Commun. Math. Phys., **271**, 699 (2007).
- [17] T. Harmark, P. Olesen, Phys Rev. D **72**, 124017 (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.



# LOW AUTO-CORRELATION BINARY SEQUENCES EXPLORED USING WARNING PROPAGATION

## "WARNING PROPAGATION" PARA SECUENCIAS BINARIAS DE BAJA AUTOCORRELACIÓN

O. E. MARTÍNEZ-DURIVE<sup>a†</sup>, I. KOTSIREAS<sup>b</sup>, R. MULET<sup>a</sup>, A. LAGE-CASTELLANOS<sup>a</sup>

a) Group of Complex Systems and Statistical Physics, Physics Faculty, University of Havana, Cuba<sup>†</sup>

b) Wilfrid Laurier University, Waterloo, Canada

† corresponding author

Recibido 24/4/2020; Aceptado 4/3/2021

The search for binary sequences with low auto-correlations (LABS) is a computationally hard discrete combinatorial optimization problem. We analyze two physically inspired algorithms to explore the low energy space of this model. The greedy,  $T = 0$ , Monte Carlo (MC) method gets trapped into the exponentially many 1-Spin-Flip stable configurations, that are typically low in energy, but still far from the global optimum. The more elaborated Warning Propagation (WP) algorithm also gets trapped into local minima. However, these local minima, are more stable to spin flips than the ones obtained by the greedy MC. We also compare the behavior of both algorithms in randomized versions of LABS, showing that the low energy space of the 4-Spin model is easier to explore than the one of LABS.

La búsqueda de Secuencias Binarias de Baja Autocorrelación (LABS) es un problema de optimización combinatoria difícil. Analizamos dos algoritmos inspirados en la física para explorar el espacio de bajas energías de este modelo. El algoritmo de Monte Carlos (MC) a  $T = 0$  queda atrapado entre la cantidad exponencial de estados semi-estables que se encuentran en la región de bajas energías pero lejos del mínimo global. El algoritmo de Warning propagation (WP), más elaborado que MC, también queda atrapado en esta región. No obstante los estados de baja energía que se obtienen con WP son más estables que los obtenidos por MC. Además comparamos el comportamiento de ambos algoritmos en versiones aleatorizadas de este modelo, mostrando que la región de baja energía del 4-Spin es más fácil de explorar que en LABS.

PACS: Statistical physics (física estadística), 05.65.+b; complex systems (sistemas complejos), 89.75.Fb; optimization techniques (técnicas de optimización), 87.55.de

### I. INTRODUCTION

The Low Auto-correlation Binary Sequence (LABS) problem consists in finding a binary sequence  $S = \{S_1, S_2, \dots, S_N\}$  where  $S_i \in \{1, -1\}$  for  $1 \leq i \leq N$  that minimizes the function

$$E(S) = \sum_{k=1}^{N-1} C_k(S)^2 \quad (1)$$

where  $C_k(S)$  are the aperiodic auto-correlation coefficients

$$C_k(S) = \sum_{i=1}^{N-k} S_i S_{i+k}. \quad (2)$$

Finding the optimal sequences is notoriously hard for increasing values of  $N$  [1].

These low auto-correlation binary sequences have many practical applications (see comments in [2]) like signal processing [3, 4], Artificial Intelligence [5], and is connected to the Littlewood problem in Mathematics [6].

The problem has been largely studied using exact and heuristic methods. The exhaustive search has a time complexity of  $O(2^N)$  and was used [7] to find optimal sequences up to  $N = 32$ . Other works applied a Branch and Bound algorithm, which is an exact method, reducing the computational cost to  $O(c^N)$  with  $c < 2$ . On [8] the value of  $c$  was taken to  $c = 1.85$ , exploring sequence up to  $N = 48$ . Later, on [9] it was proposed a new bound function with a

lower  $c = 1.8$ . On 2010, a more tight bound was proposed [10] and the algorithm was deployed on a GPU cluster, finding the optimal sequences up to  $N \leq 64$  with  $c = 1.79$ . Finally, on 2016, using a combination of the last two bounds in [2], and with a estimate value of  $c = 1.729$  it was possible to find the best known sequences up to  $N \leq 66$ . Despite these sophisticated implementations and improvements it is clear that this approach is not viable in the search of optimal sequences with larger lengths, say  $N > 100$ , for instance.

Heuristic methods have also been largely studied, as the evolutionary search [11], memetic algorithms [12] and tabu search [13, 14] reaching sizes  $N \in [61 - 77]$  with a computational cost of  $O(1.34^N)$ . A readable summary of the application of different heuristic and stochastic algorithms to LABS appears in [5] and [1]. The state of the art of heuristic algorithms according to [2] seems to be the work [1] where the authors combined a random self-avoiding walk in a Hasse graph. However, as in the case of exact algorithms, these complex and advanced heuristics fail in systems of relative big sizes ( $N > 200$ ) [2] leaving a lot of room for further improvements.

In Statistical Physics, the low autocorrelation sequences can be seen as the ground states of the Bernasconi's model [15], that implies the energy minimization of an Ising spin system with long range interacting variables with four-fold antiferromagnetic interactions.

This paper characterizes two well known simple physical

inspired algorithms on LABS instances. First, Greedy Monte Carlo (MC) and Warning Propagation (WP) are introduced and compared showing that indeed, WP is a better candidate to look for low energy configurations of the LABS problem. Later, WP is tested on disordered versions of LABS to shed light on the structure relevance of the underlying graph.

## II. PHYSICALLY INSPIRED ALGORITHMS

The minimization of the energy  $E(S)$  (cost function) can be obtained by specific methods tailored for this very problem, as those that are the state of the art for LABS, or conversely by general standard techniques. While the former are currently more efficient the latter are easier to interpret and may open the way to new disruptive ideas in the treatment of the problem. The simplest of these algorithms is the greedy minimization of the cost function. A simple greedy approach corresponds in the statistical mechanics community to the Monte Carlo method at  $T = 0$ , where variables are iteratively altered only when the proposed changes reduce the energy. It can also be seen as a discrete-variable version of a steepest descent optimization method. Typically greedy algorithms are simple to program and guaranteed to converge, but are prone to lock on non-optimal solutions.

On the other hand, since the beginning of the century, Message Passing algorithms have found their way in the realm of the statistical physics community. The turning point was the realization that message passing algorithms can be viewed as fixed point equations derived from variational approximations to the free energy of Ising-like models [16]. This inspired researchers to look for novel applications of these algorithms in the field of Combinatorial Optimization [17–19] and to explore new extensions [20–22].

In statistical physics the cost function is alternatively interpreted as the Hamiltonian or the Energy of the model. In the case of LABS (1) it can be represented by a standard factor graph [16], where both the variables and their interactions are graphically represented. Let take as an example the part  $C_{k=1}(S)^2$  of the LABS hamiltonian (1) with  $N = 5$  spins

$$\begin{aligned} C_{k=1}(S)^2 &= \left( \sum_{i=1}^{5-1} S_i S_{i+1} \right)^2 \\ &= (S_1 S_2 + S_2 S_3 + S_3 S_4 + S_4 S_5)^2 \\ &= \text{const} + 2(S_1 S_3 + S_2 S_4 + S_3 S_5 + S_1 S_2 S_3 S_4 + S_1 S_2 S_4 S_5 + S_2 S_3 S_4 S_5). \end{aligned} \quad (3)$$

Since  $S_i = \pm 1$  are binary, every square value  $S_i^2 = 1$  can be disregarded as constant. Intuitively, the goal is to find a configuration of the variables that produces as many negative summands as possible. Each summand corresponds to an interaction, represented in the factor graph as a square node (see Fig. 1), while the variables interacting are represented as circles, joined to their corresponding interactions by an edge in the factor graph. Factor nodes index will be referred using  $a, b, c$  letters, and  $i, j, k$  for refer to the variables index. The notation  $N(a)$  will be used to refer the set of variables that

interact with the factor node  $a$ , and similar  $N(i)$  for the set of factor nodes that interact with variable  $i$ .

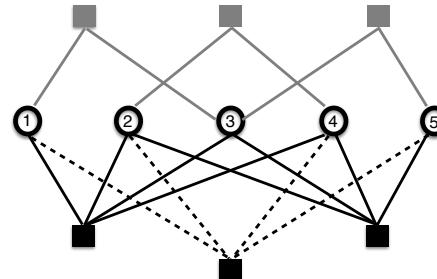


Figure 1. Graphical representation of equation (3). The variables (circles) are connected to interactions (square nodes). In gray, the three first terms (connecting only two variables), in black the other three 4-spins interactions.

### II.1. Greedy minimization: Monte Carlo at $T = 0$

The condition for a given configuration  $\{S_1, S_2, \dots, S_N\}$  to be a local energy minimum of LABS can be written in the following way

$$S_i = \text{sign}(H_i) \quad (4)$$

$$\text{where } H_i = \sum_{b \in N(i)} U_{b \rightarrow i} \quad \text{and } U_{a \rightarrow i} = -\text{sign}(S_j S_l S_k). \quad (5)$$

In this notation,  $U_{a \rightarrow i}$  acts as the local opinion of the interaction  $a$  on which direction should the variable  $S_i$  be pointing to, while  $S_i = \text{sign}(H_i)$  ensures that each variable points to the direction suggested by the majority of its factor nodes. A local minimum is the situation in which every spin points in the direction of its total field. Configurations satisfying such condition can not minimize its energy with a unique spin-flip, and therefore are called 1-spin flip stable configurations (1-SFS).

The greedy Monte Carlo algorithm corresponds to the sequential search for 1-SFS states by randomly modifying the variables that are frustrated  $S_i H_i < 0$ , as shown in Algorithm

**Require:** Set of spins  $\{S_1, \dots, S_N\}$ , and a set of interactions  $\{a = (S_i, S_j, S_k, S_l), b = (S_h, \dots)\}\}$ .

**Ensure:** Returns 1-spin flip stable configuration

```

 $\vec{S} = \text{Random-Select}(\{\pm 1\}^N)$  {Take a random starting sequence}
Compute all messages  $U_{a \rightarrow i}$  and  $H_i$  using eq. (5)
 $F_{set} = \{i | S_i H_i < 0\}$ 
while  $F_{set}$  not empty do
     $j = \text{Random-Select}(F_{set})$ 
     $S_j = -S_j$  {Flip a frustrated spin}
    Compute all messages  $U_{a \rightarrow i}$  and  $H_i$  using eq. (5) {Actually only those affected by the flip}
     $F_{set} = \{i | S_i H_i < 0\}$ 
end while
return  $\vec{S}$ 

```

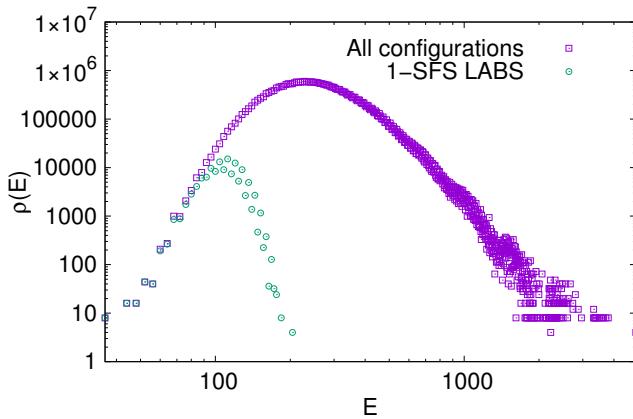


Figure 2. Density of states and density of 1-Spin flip stable configurations for the LABS problem with  $N = 25$ . Both results obtained from an exhaustive enumeration of all the  $2^{25}$  configurations.

It is easy to show that at every iteration, the total energy of the system is reduced. Since such energy is bounded by below greedy Monte Carlo has the following properties

1. the algorithm stops after a finite number of steps
2. the state found is a 1-SFS configuration, meaning that the total energy of the system can not be lowered by a single spin change.

Of course, the binary sequence with the lowest autocorrelation is one of such 1-SFS states, since it is the absolute energy minimum. However, there are (exponentially in  $N$ ) many such stable states (see Fig. 2), and Monte Carlo greedy minimization will usually get stuck in one of them, far from the global optimum.

## II.2. Warning Propagation

Message passing algorithms, like sum-product [23], belief propagation [16], and warning propagation [24] have been derived more than once in different communities and for different applications, with different balances between rigor and intuition. A standard approach presents them as an approximation to study the properties of the measure

$$P(S) = \frac{1}{Z} \exp(-\beta E(S)). \quad (6)$$

In the limit of low temperatures ( $\beta = 1/T \rightarrow \infty$ ) the measure concentrates on the configurations of lowest energy, and therefore good approximations can be transformed into good optimization procedures. Warning propagation corresponds to the zero temperature limit of the Bethe approximation in statistical mechanics. Said in other terms, the max-sum algorithm corresponds to the zero temperature limit of the sum-product one (standard belief propagation).

WP is implemented in terms of two types of messages:  $U_{a \rightarrow i}$  carrying information from interaction node  $a$  to any of its variables  $i$ , and the converse  $H_{i \rightarrow a}$  sending information from

variable  $i$  to one of its interactions. It is possible to derive the following two equations relating these messages by taking the appropriate  $T = 0$  limit in the belief propagation equations

$$\begin{aligned} U_{a \rightarrow i} &= -\text{sign}(H_{j \rightarrow a} H_{l \rightarrow a} H_{k \rightarrow a}) \\ &= -\text{sign}\left(\prod_{j \in N(a) \setminus i} H_{j \rightarrow a}\right) \end{aligned} \quad (7)$$

$$H_{i \rightarrow a} = \sum_{b \in N(i) \setminus a} U_{b \rightarrow i}. \quad (8)$$

The expression  $U_{a \rightarrow i}$  is expanded for the case of factor nodes  $a$  with four variables, but it is clear from the compacted form that in the case of two-variables factors, the equation reduces to  $U_{a \rightarrow i} = -\text{sign}(H_{j \rightarrow a})$ .

The WP equations are a “cavity” version of the Monte Carlo ones (5), where the cavity term refers to the fact that self interaction  $U_{a \rightarrow i}$  is removed from (8) in the definition of the field  $H_{i \rightarrow a}$ .

The Warning Propagation algorithm consists of iterating the messages eqs. (7, 8) until convergence, as shown in algorithm:

**Require:** Set of interactions  $\{a = (S_i, S_j, S_k, S_l), b = (S_h, \dots), \dots\}$ , maximum number of iterations  $T_{max}$ .

**Ensure:** Returns a fixed point of WP, or “NonConverged”.

Initialize all fields  $H_{i \rightarrow a}$  picking uniform from  $\{-1, 0, 1\}$ .

```

while  $T < T_{max}$  and NotConverged do
    NotConverged = False
    Order = Random-Shuffle([1:N])
    for (i in Order) do
        for  $a \in N(i)$  do
            Update  $U_{a \rightarrow i}$  y  $H_{i \rightarrow a}$  as in eq. (7) and (8)
            if  $U_{a \rightarrow i}$  or  $H_{i \rightarrow a}$  changed then
                NotConverged = True
            end if
        end for
    end for
end while
if  $T < T_{max}$  then
    Compute total fields  $H_i = \sum_{b \in N(i)} U_{b \rightarrow i}$ 
    return  $\vec{S} = (\text{sign } H_1, \text{sign } H_2, \dots, \text{sign } H_N)$ 
else
    return “Non Converged”
end if
```

There is a trivial fixed point of this algorithm, where all messages are zero, but it is highly unstable, and even a tiny fraction of non zero messages at the beginning takes the algorithm to other non-trivial and more informative fixed points. In the case that the algorithm reaches convergence (fixed point of the fields), you can recover a local energy minimum by setting the total field to  $H_i = \sum_{b \in N(i)} U_{b \rightarrow i}$  and the spins to  $S_i = \text{sign } H_i$ . We found that WP generally converge in instances of LABS, however, it requires running times that are orders of magnitude larger than Monte Carlo. This disadvantage is partially compensated by a nice property:

1. fixed point solutions of warning propagation correspond to configurations that are stable with respect

to flipping any set of interacting variables that are singly connected (a tree), or belong to a single loop, or to a disjoint union of these types of sets [25].

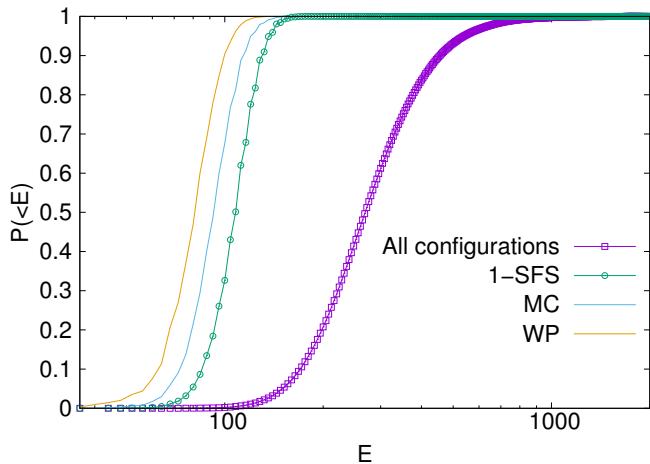


Figure 3. Cumulative distribution of energies for MC T=0 and WP compared to the density of 1 Spin-flip stable configurations for LABS  $N = 25$ . WP explores the lower energies more frequently than MC, and both explore the very low energy sub-space of the configurations space.

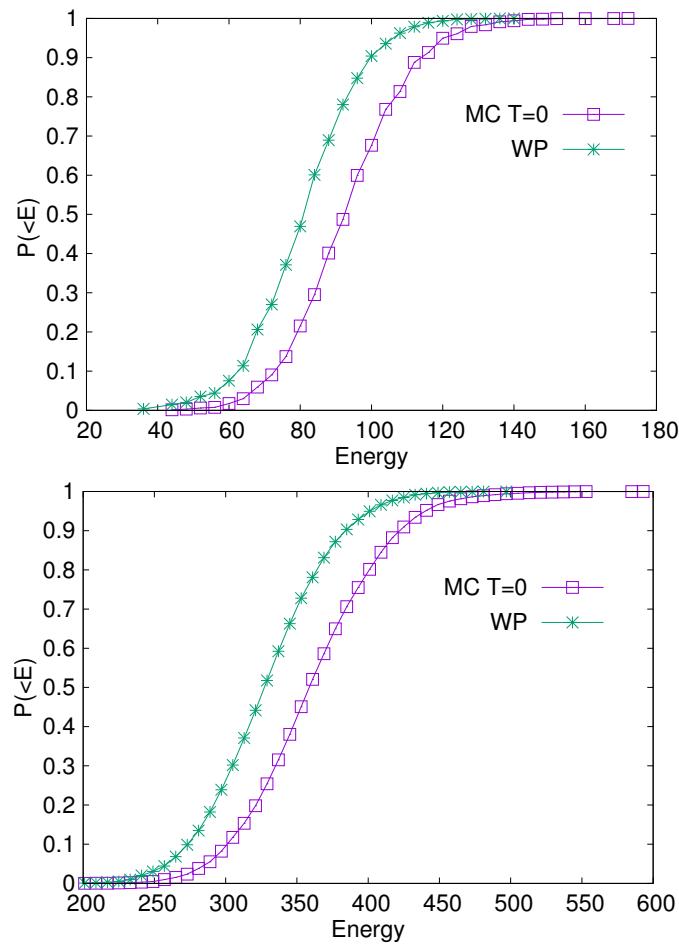


Figure 4. Top,  $N = 25$ , bottom  $N = 50$ . Cumulative probability of finding configurations below a given energy for Greedy Monte Carlo and Warning Propagation. In both figures Warning Propagation algorithm is shown to outperform Greedy Monte Carlo.

This implies that all WP fixed points are also Monte Carlo stable states, while the reverse is not true. The number of

fixed points of WP is usually also large, but being the stability requirement more demanding, they are expected to be fewer and concentrate at lower energies than those of  $T = 0$  Monte Carlo. For this reason, WP seems a good candidate to attack the optimization in LABS.

Figures 3 and 4 show the distribution of energies for the states given by both algorithms Greedy Monte Carlo at  $T = 0$  and Warning Propagation. Figure 3 points to the fact that both MC and WP concentrate in the very low part of the full spectrum of energies for a small system  $N = 25$ . Fig 4 zooms into the low energies and shows the cumulative probability function of the energies of the resulting states after 1000 runs of Monte Carlo and WP for two system sizes  $N = 25, 50$ . As expected, Warning Propagation finds low energy configurations with higher probability. However, neither of the algorithms is particularly good at finding the global optimal configurations at  $E_{25}^0 = 36$  and  $E_{50}^0 = 153$  respectively.

Finally, Fig. 5 shows the average behavior of both algorithms at growing values of  $N$ . Both algorithms find typical states (see symbols for Mean MC, Mean WP) with an energy that is much lower than the typical energy of a LABS sequence at random (Mean LABS), indeed far more lower than one standard deviation of the energy spectrum. This mean that they found rare configurations of low energy. Moreover, Warning propagation is always better than Monte Carlo, but at a price of larger running times. Unfortunately, the smallest energy values known for LABS ( $N \leq 66$ ) are also far from the typical results from MC and WP, and furthermore, even running both algorithms 1000 times, and picking its best converged result (Optimal MC, Optimal WP) still produce configurations that are far from the ground states for large values of  $N$  (see Figure 6).

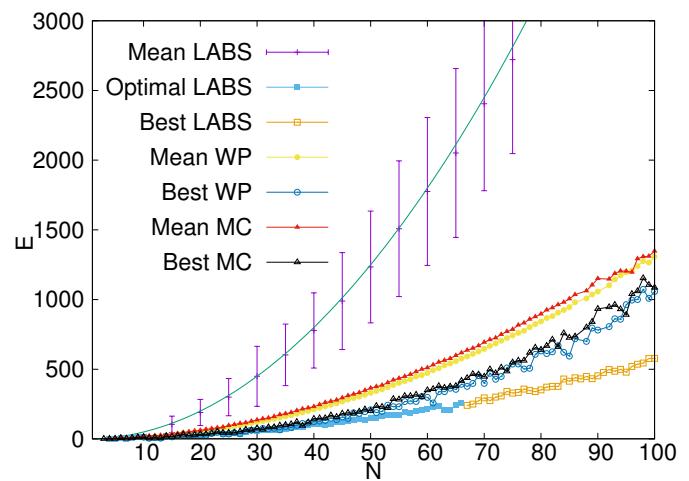


Figure 5. Lowest points are the best known sequences (either known to be the optimal (full squares) or the best guess (open squares)). The highest curve is the mean energy of all the configurations in LABS, and the bars mark the standard deviation from it. Typical solutions from both LABS and MC are well below the typical energies, but still far from the optimal ones. Circles and triangles show the best sequences found by WP and MC in 1000 attempts.

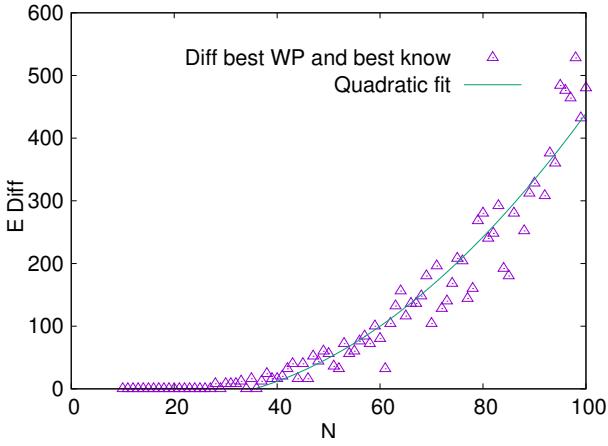


Figure 6. The points represent the energy difference between the lowest energy value in 1000 WP attempts and the best known values reported in the literature. The solid line is a quadratic fit expression  $0.08x^2 - 4.7x + 61$ .

### III. DISORDERED VERSIONS OF LABS

Already in 1994 a series of papers followed a different path [26–28]. They approached the problem borrowing techniques and concepts from the statistical physics of disordered systems, and the model, since then, became a paradigm for the existence of glassy phases in systems without disorder. The idea then was to study a disordered version of the LABS problem and to predict its average properties in the infinite size limit. In short, it is possible to write equation (1) as:

#### Definition 1. LABS

$$E(S) = \sum_{k=1}^{N-1} \left( \sum_{i,j} J_{i,j}^k S_i S_j \right)^2 \quad (9)$$

where for LABS  $J_{i,j}^k$  is defined as:

$$J_{i,j}^k = \begin{cases} 1 & j = i + k \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (10)$$

A disordered version of the model [26] may be achieved by relaxing the spatial structure in the autocorrelations  $J_{i,j}^k$ :

#### Definition 2. Mean Field LABS

$$J_{i,j}^k = \begin{cases} 1 & \text{with probability } (N-k)/N^2 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (11)$$

this is a sort of Mean Field (MF) version of the problem that preserves the connectivity of the variables, but diminishes the correlations between them randomizing  $J_{i,j}^k$ . Studying such a model it was possible to introduce ideas and methods developed for spin glasses [29] and to find that the system undergoes a first order transition with a glassy phase at low temperatures, much as if quenched disorder was present [26].

Another model, which reminds the original LABS problem, is the anti-ferromagnetic p-Spin model (with  $p = 4$ ) defined by the energy function:

#### Definition 3. 4-Spin

$$E(S) = \sum_{i,j,k,l} J_{i,j,k,l} S_i S_j S_k S_l \quad (12)$$

where  $J_{i,j,k,l}$  is a random diluted matrix with elements 0 and 1 chosen with the same number of interactions than the LABS model.

Although the model is well understood in the diluted and fully connected regimes [30, 31], as far as we know it has never been compared with LABS or its mean field version. The three models share a similar formal structure, defined by a set of binary variables  $S_i = \pm 1$  interacting antiferromagnetically in groups of four (mostly). In physics, antiferromagnetic interactions refer to situations where the optimal configuration for the interacting variables is when they avoid having the same value. The arbitrariness of the matrix  $J_{i,j,k,l}$  in p-Spin allows for energies  $E(S)$  (eq. (12)) with negative values, while in the Mean field and LABS cases (eq. 9), the square guarantees that energies remain positive. The LABS is the most ordered instance of these three models since the groups of interacting variables are not only correlated by the square but also by some spatial structure  $j = i + k$  in (10).

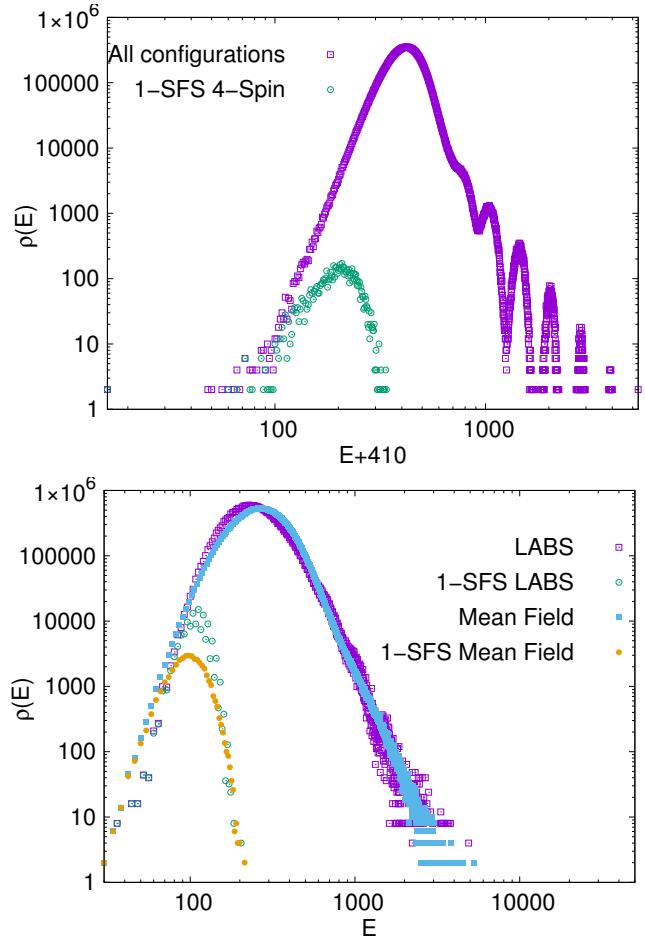


Figure 7. The energy distribution of all the configurations and 1-SFS configurations in the three models p-Spin (top), LABS and MF (bottom). The system size is  $N = 25$ . There is very similar behaviour between LABS and Mean Field model, the PSpin model exhibit a more rich structure for high energy configurations and allow configurations with negative energy value (note that it has been shifted to fit within a log-log plot).

The greedy Monte Carlo and Warning Propagation algorithm are readily applied to this modified models. An exhaustive enumeration of energies in the configuration space of  $N = 25$  models in Fig. 7 exhibit some regularities among the three versions, being LABS and its Mean Field version the most similar. The p-Spin have a richer high energies structure. In all three cases, 1-SFS configurations concentrate in the lower energies range of the spectrum.

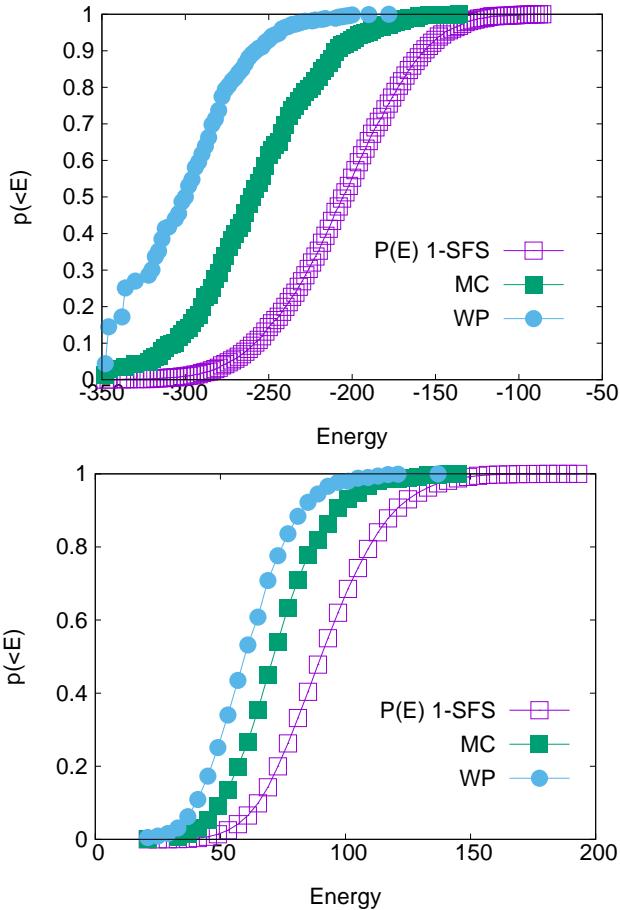


Figure 8. Cumulative distribution of Warning Propagation and Monte Carlo in an  $N = 25$  instance of the disordered models p-Spin (top) and Mean Field (bottom). For comparison, the exhaustive enumeration of the 1-SFS configurations is plotted in empty symbols.

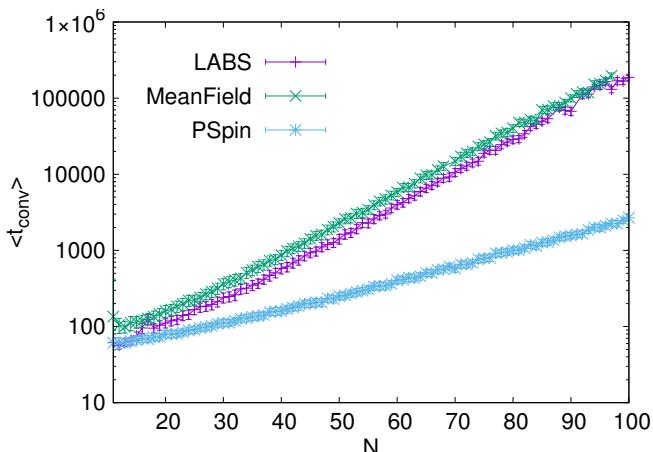


Figure 9. Number of iterations required to reach convergence of WP algorithm on Mean Field, LABS and p-Spin. Each point is an average over 100 runs.

Monte Carlo at  $T=0$  locates 1-SFS states and also (as it did in LABS Fig. 2) samples the lower energies 1-SFS more frequent than the higher ones (see Fig. 8). The behavior of WP and Monte Carlo mark a difference between p-Spin and Mean Field. It seems that the low energy states of p-Spin are more easily accessible by both algorithms than in the Mean Field or LABS cases. This difference suggest that the randomness of p-Spin is somehow simplifying the energy landscape. A supposition that is further supported by the running times of WP in each model, as shown in figure 9, where the number of iterations required to converge in LABS and Mean Field grew exponentially with roughly the same rate, while in p-Spin the growing was with a lower rate, consistent with a simpler energy landscape.

#### IV. CONCLUSIONS

We have applied two methods ( $T = 0$  Monte Carlo and Warning Propagation) to LABS problem. Both methods concentrate in the low energy part of the spectrum of LABS. While Greedy  $T = 0$  Monte Carlo converges always (and fast) to 1-SFS solutions, WP generally converges but takes running times that are much larger. On the positive side, WP explore states that are lower in energy than the 1-SFS states of the greedy Monte Carlo.

Unfortunately, both algorithms stuck in a large number of suboptimal fixed points at low energies. Therefore, the lowest autocorrelated sequence remains hard to find for both of them. At the present stage, we only tried to find it by running each algorithm many times from random initial conditions.

We conclude that these two general methods, although simpler, are less powerful than the state of the art optimization techniques for LABS as those in [1], and fail to give good estimates of the lowest energies for large systems.

To shed some light on this direction we also tried warning propagation on two disordered versions of the LABS problem. While a mean field version of LABS have similar properties to LABS, the p-Spin version seems to be notably easier. This suggest that statistical physics results from p-Spin might not be readily translated to LABS.

Improving over the present work could follow two standard paths in the physics of disordered systems. The first is the use of Survey Propagation algorithm [32] that improves over WP by considering the multiplicity of solutions of WP fixed points. The other would be the inclusion of larger regions in the approximation of the free energy, as is done by Cluster Variational Methods [22,33,34], which in this case might be relevant since the basic interactions of the model is between groups of 4 variables. We are currently exploring both.

#### REFERENCES

- [1] B. Boskovic, F. Brglez, J. Brest, arXiv preprint arXiv:14065301 (2014).
- [2] T. Packebusch, S. Mertens, J. Phys. A **49**, 165001 (2016).
- [3] B. S. Naick, P. R. Kumar, Int. J. Comp. Applic. **106**, (2014).
- [4] J. Kratica, Serdica J Comput **6**, 385 (2012).

- [5] J. E. Amaya, M. d. I. A. Tarazona, 11 th Latin American and Caribbean Conference for Engineering and Technology, August 14-16 (2013).
- [6] J. E. Littlewood, Some problems in real and complex analysis (DC Heath, 1968).
- [7] M. J. E. Golay, IEEE Trans. Inf. Theory **28**, 543 (1982).
- [8] S. Mertens, J. Phys. A **29**, L473 (1996).
- [9] S. Prestwich, Ann. Oper. Res. **156**, 129 (2007).
- [10] J. Wigggenbrock, Parallele optimierungsstrategien des labs problems in einem gpu-grid., Master's thesis, Fachhochschule Sudwestfalen (2010).
- [11] B. Militzer, M. Zamparelli, D. Beule, IEEE Trans. Evol. Comput. **2**, 34 (1998).
- [12] J. E. Gallardo, C. Cotta, A. J. Fernández, Genetic and Evolutionary Computation Conference, GECCO 2007, Proceedings, London, England, UK, July 7-11, 2007, 1226 (2007).
- [13] I. Dotsu, P. V. Hentenryck, Principles and Practice of Constraint Programming - CP 2006, 12th International Conference, CP 2006, Nantes, France, September 25-29, 2006, Proceedings, 685 689 (2006).
- [14] S. Halim, R. H. C. Yap and F. Halim, Principles and Practice of Constraint Programming, 14th International Conference, CP 2008, Sydney, Australia, September 14-18, 2008. Proceedings, 640 645 (2008).
- [15] J. Bernasconi, Journal de Physique **48**, 559 (1987).
- [16] J. S. Yedidia, W. T. Freeman, Y. Weiss, IEEE Trans. Inf. Theory **51**, 2282 (2005).
- [17] R. Mulet, A. Pagnani, M. Weigt, R. Zecchina, Phys. Rev. Lett. **89**, 268701 (2002).
- [18] A. Braunstein, R. Mulet, A. Pagnani, M. Weigt and R. Zecchina, Phys. Rev. E **68**, 036702 (2003).
- [19] M. Weigt and H. Zhou, Phys. Rev. E **74**, 046110 (2006).
- [20] M. Mezard and R. Zecchina, Phys. Rev. E **66**, 056126 (2002).
- [21] T. Rizzo, A. Lage-Castellanos, R. Mulet and F. Ricci-Tersenghi, J. Stat. Phys. **139**, 375 (2010).
- [22] J. S. Yedidia, W. T. Freeman, Y. Weiss, Exploring artificial intelligence in the new millennium **8**, 236 (2003).
- [23] F. R. Kschischang, B. J. Frey and H.-A. Loeliger, IEEE Trans. Inf. Theory **47**, 498 (2001).
- [24] L. Zdeborovsa, Statistical Physics of Hard Optimization Problems, Ph.D. thesis, PhD Thesis, 2008 (2008).
- [25] Y. Weiss, W. T. Freeman, IEEE Trans. on Information Theory **47**, 736 (2001).
- [26] J.-P. Bouchaud, M. Mezard, J. Phys. I **4**, 1109 (1994).
- [27] E. Marinari, G. Parisi, F. Ritort, J. Phys. A **27**, 7615 (1994).
- [28] G. Migliorini, F. Ritort, J. Phys. A **27**, 7669 (1994).
- [29] M. Mezard, G. Parisi, M. A. Virasoro, Spin glass theory and beyond, volume 9 of World Scientific Lecture Notes in Physics (World Scientific Publishing Co., Inc., Teaneck, NJ, 1987).
- [30] M. Mezard, F. Ricci-Tersenghi, R. Zecchina, J. Stat. Phys. **111**, 505 (2003).
- [31] T. Castellani, A. Cavagna, J. Stat. Mech. P05012 (2005).
- [32] A. Braunstein, M. Mezard, M. Weigt, R. Zecchina, Computational complexity and statistical physics, St. Fe Inst. Stud. Sci. Complex., 107 124 (Oxford Univ. Press, New York, 2006).
- [33] A. Pelizzola, J. Phys. A: Math. Gen. **38**, R309 (2005).
- [34] E. Dominguez, A. Lage-Castellanos, R. Mulet, F. Ricci-Tersenghi, T. Rizzo, J. Stat. Mech.: Theory Exp. **2011**, P12007 (2011).

---

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.



# AN INTEGRATED $\Delta\Sigma$ A/D ARCHITECTURE FOR SMART ISFET

## ARQUITECTURA INTEGRADA $\Delta\Sigma$ A/D PARA UN SMART ISFET

D. GARNIER-FERNÁNDEZ<sup>a</sup>, F. SERRA-GRAELLS<sup>b,c</sup>, C. JIMÉNEZ-JORQUERA<sup>b</sup>, A. BALDI-COLL<sup>b</sup>, O. ARIAS DE FUENTES<sup>a†</sup>

a) Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, 10400, La Habana, Cuba; oarias@imre.uh.cu<sup>t</sup>

b) Instituto de Microelectrónica de Barcelona (IMB-CNMI), Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), 08193, Cerdanyola, Barcelona, España

c) Departamento de Microelectrónica y Sistemas Electrónicos, Universitat Autònoma de Barcelona, Barcelona, España

† corresponding author

Recibido 24/11/2020; Aceptado 30/1/2021

In this paper, we present an architectural and electrical design of an integrated A/D converter configuration, based on  $\Delta\Sigma$  modulation, for data acquisition from an ISFET (Ion Sensitive Field Effect Transistor) microsensor, applied to the development of a Smart ISFET. This A/D architecture in continuous-time, incorporates the microsensor as a component of the integrated circuit, together with the required electronics for the automatic correction of the ISFET's offset fulfilling the necessary requirements for the development of a portable device.

PACS: Microelectronics: Integrated circuits (microelectrónica: circuitos integrados), 85.40.-e; Field Effect Transistor (transistor de efecto de campo), 85.30.Tv; data acquisition (adquisición de datos), 07.05.Hd; general instrumentation for transducers (instrumentación general para transductores), 07.07.Mp

### I. INTRODUCTION

The ISFET microsensors are, intrinsically, pH chemical sensors, but they can detect and quantify other ions and molecules when are modified with different inorganic and organic membranes, giving rise to devices such as the so-called Chemically Modified Field Effect Transistors (CHEMFETs) and Enzymatic Field Effect Transistors (EnFETs), among others [1].

In the early 1970s, for the first time, Bergvel reported ISFETs as a modification of the Field Effect Transistors of Metal-Oxide-Semiconductor Structure (MOSFETs) [2]. These microsensors, shown in figure 1, are very similar to MOSFETs, which make them ideal for their microelectronic integration. This similarity also provides advantages such as low noise level, low power consumption, and reduced size, useful properties for their application in the increasingly demanded portable devices. In addition, ISFET's intrinsic characteristics (low output impedance, robustness, durability, short response time, low manufacturing cost), gives it advantages over other conventional sensors such as, for example, glass electrodes for pH measurement [3, 4]. They can be used in diverse applications in biomedical and environmental fields and in analytical chemistry among others areas [4, 5].

The most recent work related to ISFETs focus on achieving adequate instrumentation for applications potentially linked to the molecular environment, also making use of sensor arrays with their associated electronics in each pixel. In this sense, the works developed by the group of Dr. P. Georgiou from the Imperial College reported real-time detection of genetic material making use of typical polarization

En este trabajo presentamos el diseño arquitectural y eléctrico de una configuración de conversor A/D integrada, basada en la modulación  $\Delta\Sigma$ , para la adquisición de datos de un microsensor ISFET (Transistor de Efecto de Campo Sensible a Iones), aplicado al desarrollo de un Smart ISFET. Esta arquitectura A/D en tiempo continuo, incorpora al microsensor como componente del circuito integrado, así como la electrónica requerida para la corrección automática del offset del ISFET, lo cual permite dar cumplimiento a los requisitos necesarios para el desarrollo de un dispositivo portátil.

configurations, based on the modified common source configuration [6]. Other studies reporting instrumentation associated with ISFETs focus on the pH-time conversion, and are more oriented to detection than to quantification. An example is the work carried out by Y. Jiang for the detection of the bacterium *E. coli* [7].

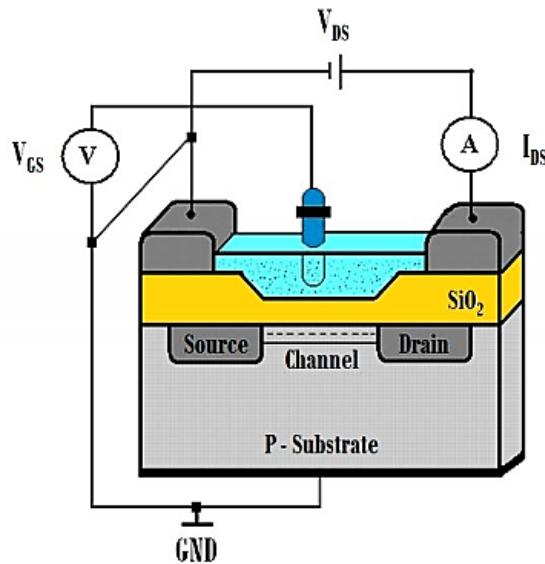


Figure 1. Schematic cross section of an N type ISFET.

Both lines of work have managed to reduce the offset and drifts of ISFETs, but not so much the noise associated with the instrumentation. In this work we present a new Smart ISFET model based on continuous-time (CT) and fully adjustable second-order  $\Delta\Sigma$  A/D interface, which allows

the integration of an ISFET microsensor, with the requiring polarization elements for its operation, and its automatic electronic offset compensation, as well as the data acquisition and digitization stages. The architecture proposed in this work also has advantages such as a significant reduction in the number of components, compared with discrete electronics, low power consumption, low noise and auto-calibration of the microsensor, together with the attenuation of some of their limitations.

This new design will facilitate the development of portable devices for their applications in measurement of physiological chemical variables associated with certain diseases, for example, cystic fibrosis or an undesirable physiological state, such as dehydration. The work is organized as follows: Section II presents the Smart ISFET's architecture and its characteristics; Section III, offers the electrical design at transistor level, with emphasis on the  $\Delta\Sigma$  A/D; Section IV reports the simulation results and finally, Section V presents the conclusions.

## II. SMART ISFET $\Delta\Sigma$ A/D ARCHITECTURAL DESIGN

Figure 2 presents the Smart ISFET's general scheme. The acquisition and digitization data coming from the microsensor are achieved with the use of a second-order continuous-time delta-sigma modulator ( $\Delta\Sigma M$ ).

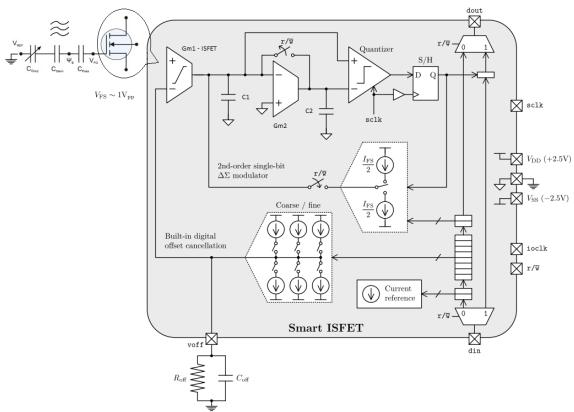


Figure 2. General scheme of Smart ISFET.

The general scheme is basically the architectural scheme of the designed ASIC. In the upper part of the figure are the main elements of the sigma-delta ADC (transconductance amplifiers  $G_{m1,2}$ , the comparator and a D-type Flip Flop). In order to correct the ISFET offset, in the lower part of the figure we can see a current DAC with its input connected to a control logic and its output to the first transconductance amplifier (OTA).

The diagram also shows the input/output terminals. Among them, the input signal ( $V_{FS}$ ), connected to the non-inverting terminal of the first OTA representing the gate voltage of the microsensor.

In the figure 2 we can also see the elements corresponding to the passive current filtering stage for cancellation of

accompanying current noise. In section III, we explain the main blocks of this scheme related to the Sigma-Delta modulator.

In figure 2, the input signal corresponding to the gate voltage of the ISFET ( $V_{FS}$ ), and related to the ionic concentration in the active region of the microsensor, can operate in a range of  $1 V_{P-P}$ , by design. This signal, along with the feedback signal, starts the A/D conversion cycle.

In comparison to more complex architectures the most outstanding features of this proposal are its excellent linearity/bit characteristic, its high resolution (with only 1 bit of quantification) and its simplicity for its microelectronic integration. Furthermore, its wide adjustment possibilities from different  $\Delta\Sigma$  configurations, gives flexibility for the control of energy consumption and for its self-calibration and the system calibration.

Furthermore, among the most important quantitative features of this architecture are the oversampling ratio (OSR), the oversampling frequency ( $F_{OSR}$ ) and the order of the modulator (n). All of these characteristics are related to the signal-to-noise ratio parameter (SNR), which, at the same time, has a close relationship with the resolution (B) of conversion [8, 9]. Equation 1 shows this relationship.

$$SNR = \frac{3\pi}{2} \cdot (2^B - 1)^2 \cdot (2n + 1) \cdot \left( \frac{OSR}{\pi} \right)^{2n+1} \quad (1)$$

Notice how an increase in the OSR or in the order of the modulator, generates an increase in the resolution of the A/D converter due to an increase in the SNR. This is an important issue to consider in the design stage.

Another important issue at this stage, in order to provide an output signal in each integrator according to the desired conversion resolution, is the determination of the integration constants  $G_{m1}$  and  $G_{m2}$ . With the aim to minimize the complexity of the design, it has been imposed that both transconductances values and therefore the integration constants be equal. These constants are calculated from the relationships expressed in equation 2 taking into account the frequency value obtained by the expression 3 for the frequency  $F_2$ .

$$F_{1,2} = \frac{1}{2\pi} \frac{G_{m1,2}}{C_{1,2}}, \quad (2)$$

$$F_2 < \frac{F_{OSR}}{2\pi}. \quad (3)$$

The frequency values  $F_{1,2}$  were obtained for capacitance values of  $C_1 = 32 \text{ pF}$  and  $C_2 = 8 \text{ pF}$ , respectively. The  $G_{m1,2}$  values were adjusted to get  $F_{1,2}$  values of 0.5 kHz and 2 kHz, respectively to ensure a working resolution of the order of 12 bits, leaving an error margin of  $\pm 1$  bit.

According to the previously calculated frequency values  $F_{1,2}$ , in figure 3 is shown the occupancy histogram for the output signal of the integrators. This graph shows the non-saturation of the integrators, since as it can be seen, the samples are not dispersed, but confined in a narrow voltage range between  $\pm 0.1 \text{ V}$ .

The table 1 summarizes the main general design parameters, according to the requirements established for the system to implement.

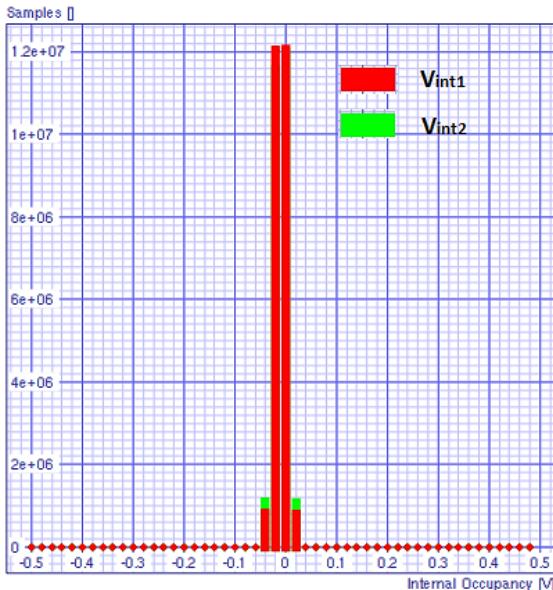


Figure 3. Occupancy histogram (integrator output response).

Table 1. Summary of the main parameters of the system

Signal frequency ( $F_{Signal}$ )	62.5 Hz ( $\Omega$ )
Sampling frequency ( $F_{OSR}$ )	64 kHz
Oversampling ratio (OSR)	128
Bandwidth (BW)	250 Hz
Effective Number of bits (ENOB)	12 bits
Gain of integrators ( $G_{m1} = G_{m2}$ )	100 ns

### III. ELECTRICAL DESIGN OF THE $\Delta\Sigma$ A/D ARCHITECTURE FOR THE SMART ISFET

In order to manufacture the Smart ISFET with CMOS technology of 2.5 microns (CNM25) it was necessary to design the necessary electrical blocks that make up the  $\Delta\Sigma$  A/D architecture. By this way it was possible the integration of the ISFET microsensor, the electronics associated with its self-calibration, as well as the data acquisition and digitization stages.

#### III.1. Integrator with constant transconductance ( $G_m$ )

A step of great importance is the design of the transconductance values ( $G_{m1,2}$ ). Especially, the  $G_{m1}$  transconductance taking into account its necessary linearity requirements to preserve the information of the microsensor output signal. Figure 4 shows the basic electrical architecture scheme of the transconductance selected according to this condition.

This design scheme responds to the topology known as classical cross-coupled differential core, with the transistors MI4 (microsensor ISFET) and MI7 operating in saturation

mode. Corresponding to figure 2, terminal  $V_1$  receives the  $V_{FS}$  signal from the microsensor. This configuration ensures linearity in differential pair for a given voltage range [10,11].

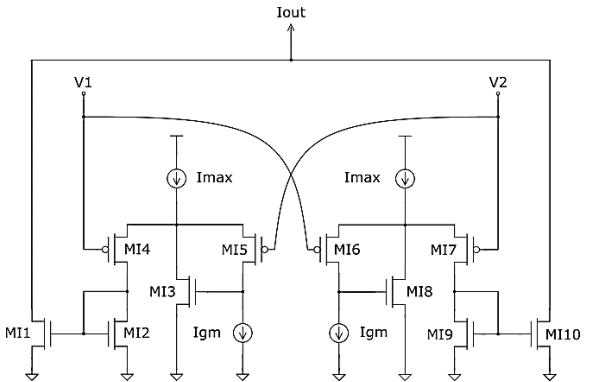


Figure 4.  $G_{m1,2}$  - Electrical core design.

This condition is adjusted by the transistors MI3 and MI8, by maintaining a constant current flowing through the transistors MI5 and MI6. When the output current reaches  $(+I_{MAX} - I_{GM})$  or  $(-I_{MAX} + I_{GM})$ , MI3 or MI8 are cut off. Above or below these current values the circuit shows a non-linear behavior as shows figure 5.

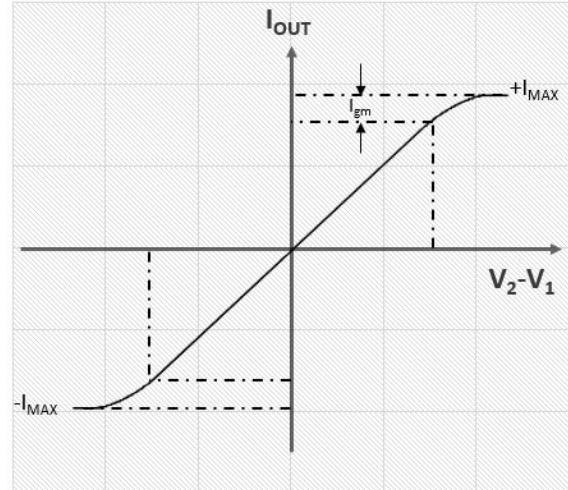


Figure 5. Limiting function for output current.

The resulting signal  $I_{out}$ , and its relationship to the adjustable transconductance, is expressed by equation 4.

$$G_m = \frac{I_{OUT}}{V_2 - V_1} = 2^2 \sqrt{\frac{2\beta I_{GM}}{n}} \quad (4)$$

#### III.2. Low power Latched Comparator

A latch-type comparator is an ideal option for the implementation of the 1-bit quantifier of a CT- $\Delta\Sigma$  A/D, due to its full output oscillation, high input impedance and absence of static energy consumption. Precisely because of this, an architecture based on this type of converter was designed [12,13].

Figure 6 shows the base architecture of the comparator designed.

This configuration, supplied with  $I_{bias} = 1 \mu\text{A}$ , mixes, with two inverters with preset in metastability, the currents that are generated in each branch of the differential input pairs (MI1, MI2) as a result of the voltage disparity in the terminals  $+V_{IN}$  and  $-V_{IN}$ . The mix is controlled by a MI7 transistor in switch configuration and with a CLKZ control signal. By this architecture it is possible to significantly reduce the undesirable kickback input effect.

Furthermore, a D-type Flip Flop coupled to this architecture ensure an effective digitization of the signals (see figure 2).

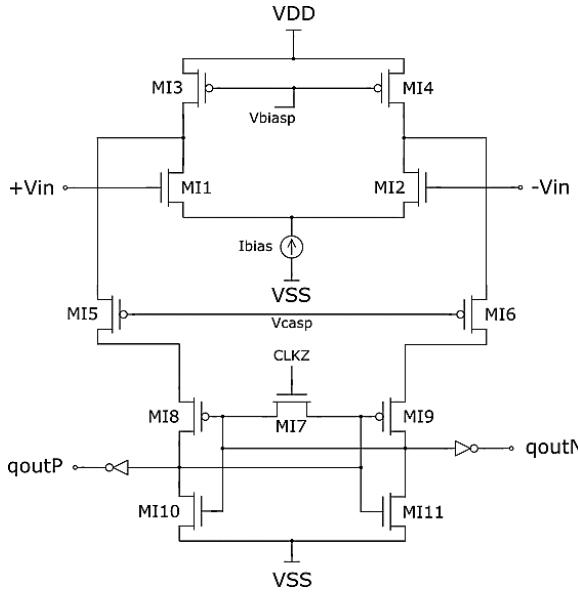


Figure 6. Latched comparator core.

The final digital signal is also part of the feedback of the  $\Delta\Sigma$  modulator, that passes through a 1-bit current DAC, whose output signal is added to, or subtracted from the output of  $Gm_1$ , starting again an A/D conversion cycle.

The simulation tests performed to the comparator show values of 300 ns of conversion time, a power dissipation of 1.46 mW with a clock signal of 64 kHz.

#### IV. SIMULATION TEST PERFORMED

In order to evaluate the response of the system and its performance, a set of simulation tests were done using the free Spice Opus software, with the Spice 3 language.

The simulation tests are focused on three specific evaluations: signal-noise-distortion relation (SNDR), dynamic range (SQNDR) and occupancy histograms (integrator output response). These evaluations are crucial for the verification of the correct operation of the A/D converters [14].

##### IV.1. Signal-Noise-Distortion Ratio

As mentioned in Section II, the SNR is an important metric element when the dynamic behavior of an A/D converter is

evaluated. SNR is the relationship established between the output power at the frequency of a sinusoidal input signal and the bandwidth of the total quantization noise [15, 16]. Its relation to the resolution of the  $\Delta\Sigma$  A/D converter was expressed by equation 1, but in terms of power. Equation 5 is used to calculate the SNR.

$$SNR(dB) = 10 \log_{10} \frac{P_{signalout}}{IBN}. \quad (5)$$

In this expression,  $P_{signalout}$  is the output power at the frequency of an input sinusoid and IBN is the in-band quantization noise power.

The equation 5, accounts for the modulator linear performance only, so that the in-band power associated to harmonics of the input signal is not considered as part of the IBN to SNR computation. Therefore, it is important to obtain and evaluate the SNDR.

The SNDR is defined as the ratio of the output power to the frequency of an input sinusoid with respect to the total power of IBN (total), taking into account the possible harmonics at the output of the modulator  $\Delta\Sigma$ . It is calculated similarly to the SNR [17].

Calculating the SNDR the distortions generated in the processed signal due to the non-idealities of the electronic components and circuits are taken into account resulting in a more detailed evaluation of the modulator performance.

Figure 7 shows the corresponding graph to SNDR.

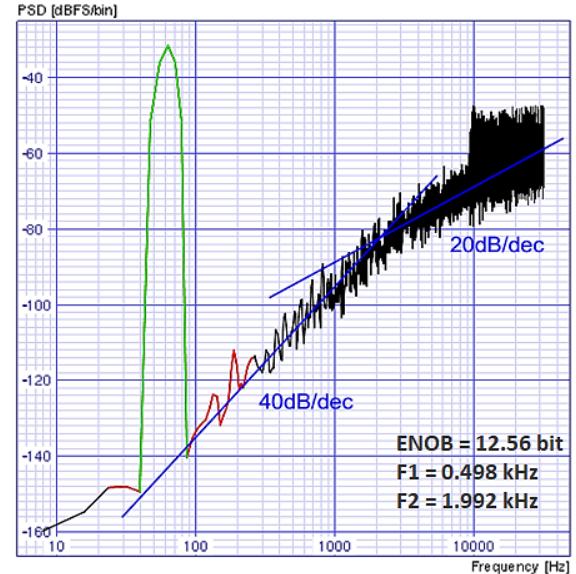


Figure 7. SNDR characteristics.

It can be seen that the maximum peak amplitude or maximum power, as expected, corresponds to the frequency of the analyzed signal and is set to 62.5 Hz. It can also see how the distortions are shifted outside of the bandwidth of the signal of interest. In addition, it can be seen that the slopes of the modulator noise distribution are 40 dB/dec, near the frequency band of the signal of interest and 20 dB/dec at the far end of it. These results confirm that, at the design level, we are in the presence of a second order system.

## IV.2. Dynamic range

Dynamic range (DR) is another common performance metric for analog-to-digital converters (ADCs). DR describes the range of the input signal levels that can be reliably measured simultaneously, in particular the ability to accurately measure small signals, for which  $SNR = 0$  dB, in the presence of the large signals [17]. It is calculated by means of equation (6).

$$DR(dB) = 10 \log_{10} \frac{Y_{FS}^2}{2 \cdot IBN}. \quad (6)$$

Where  $Y_{FS}$ , is output sinusoid sweeping the full-scale range of the embedded quantizer, by a sinusoid with maximum amplitude at the modulator input.

In summary, the DR gives a notion of the ability of the A/D converter to detect and digitize small differences in amplitude between samples of a signal. This brings greater fidelity to the analogical signal from the microsensor.

Figure 8 presents the graph corresponding to the dynamic range.

This graph shows how the signal power increases, as the amplitude of the input signal increases, up to the maximum scale. This is in total correspondence with the typical behavior of the AD converter. In addition, the DR value, obtained at the x-axis intercept, is equal to -79 dBFS.

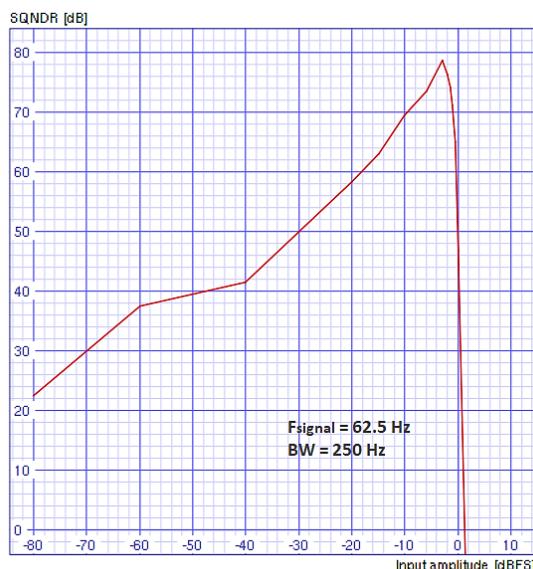


Figure 8. Dynamic range. Electrical scheme.

## V. CONCLUSIONS

The work carried out demonstrates that it is possible to obtain a second-order, continuous-time and fully adjustable  $\Delta\Sigma$  A/D converter architecture that, unlike other proposals, is less dependent on manufacturing technology and easier to implement at the microelectronic level. The new design integrates, in the same chip, an ISFET microsensor and the

necessary elements for noise compensation and automatic correction of the microsensor offset, which offers advantages compared to other implemented designs. It is important to highlight that this architecture was designed in accordance with the requirements of portable technology, making possible to obtain an intelligent ISFET based on a robust, scalable, low cost and low energy consumption design, as the main core of a device capable to carry out non-invasive measurements of chemical variables in sweat samples, taking into account that, to date, no devices have been developed for this application.

The work carried out also lays the foundations for the future manufacture of this Smart ISFET (ASIC), in order to be able to practical validate the behavior of the device with real chemical measurements.

## ACKNOWLEDGMENTS

This work has been supported by I-COOP+2016 project (CSIC ref.: COOPB20262).

## REFERENCES

- [1] Y. Syu, W. Hsu, C. Lin, ECS J. Solid State Sci. Technol. **7**, Q3196 (2018).
- [2] P. Bergveld, Sens. Actuators B. **88**, 1 (2003).
- [3] N. Moser, T. S. Lande, C. Toumazou, P. Georgiou, IEEE Sens. J. **16**, 6496, (2016).
- [4] H. Li, X. Liu, L. Li, X. Mu, R. Genov, A. J. Mason, J. Sens. **17**, 74 (2017).
- [5] S. A. Pullano, C. D. Critello, I. Mahbub, N. Tasneem, S. Shamsir, S. Islam, M. Greco, A. S. Fiorillo, J. Sens. **18**, 4042 (2018).
- [6] N. Moser et al., in 2018 IEEE International Symposium on Circuits and Systems (ISCAS), edited by Franco Maloberti and Gianluca Sett (IEEE, Florence, Italy, 2018).
- [7] Y. Jiang, X. Liu, T. C. Dang, X. Huang, H. Feng, IEEE Trans. Biomed. Circuits Syst. **12**, 402 (2018).
- [8] L. Yao, M. Steyaert, W. Sansen, Low-power low-voltage sigma-delta modulators in nanometer CMOS, 1st Ed. (Springer Science, Dordrecht, The Netherlands, 2006), pp. 19-22.
- [9] F. Gerfers and M. Ortmanns, Continuous-time sigma-delta A/D conversion: fundamentals, performance limits and robust implementations, 1st Ed. (Springer, Berlin, Germany, 2006), pp. 25-29.
- [10] E. Seevinck, R. F. Wassenaar, IEEE J. Solid-State Circuits **22**, 366 (1987).
- [11] S. Sutula, C. Ferrer, F. Serra-Graells, IEEE Trans. Circuits Syst. **58**, 1561 (2011).
- [12] K. Krishna, Y. M. A. Al-Naamani, J. Inf. Optimization Sci. **40**, 367 (2019).
- [13] E. Yaqubi, S. H. Zahiri, Analog Integrated Circuits and Signal Processing **90**, 309 (2017).
- [14] S. Mahdavi, et al., in IEEE 4th International Conference on Knowledge-Based Engineering and Innovation (KBEI), edited by Mahdi Saadati (Iran University of Science and Technology, Teheran, Iran, 2017).

- [15] K. H. Lundberg, "A high-speed, low-power analog-to-digital converter in fully depleted silicon-on-insulator technology". PhD Thesis, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts, 2002.
- [16] R. J. van de Plassche, CMOS integrated analog-to-digital and digital-to-analog converters, 1st Ed. (Springer US, New York, USA, 2003), pp. 55-57.
- [17] J. M. de la Rosa, Sigma-delta converters: practical design guide, 1st Ed. (Wiley-IEEE Press, New York, USA, 2018), pp. 2-9.

---

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.



# UNDERSTANDING RESISTANCE AND OHM'S LAW WITH ARDUINO-BASED EXPERIMENTS

## ENTENDIENDO LA RESISTENCIA Y LA LEY DE OHM CON EXPERIMENTOS BASADOS EN ARDUINO

R. SALAR<sup>†</sup>

Faculty of Education, Ataturk University, Erzurum, Turkey; rizasalar@atauni.edu.tr  
† autor para la correspondencia

Recibido 23/10/2020; Aceptado 30/6/2021

The rapid development of technology has enabled many types of technology to be used frequently by educators in learning and teaching activities. One of these frequently used educational technologies is Arduino. This study aims to determine how resistance changes depending on the cross-sectional area, length, and resistivity of the conductor using Arduino. In order to determine the factors affecting the resistance in the Arduino-based experiment, the experiment utilized the graphite leads that students use in their daily lives. An inexpensive and high mobility experiment system has been developed. The data obtained by the experimental setup complies with theoretical laws. This experiment, along with the use of Arduino, will enable students to experience Ohm's law and enable them to better understand the concepts of potential, current, and resistance in a series circuit. In addition, it is thought that the experiment will attract more attention from students by offering a technology-supported learning opportunity. Researchers and teachers can turn this experiment into a science, technology, engineering y mathematics (STEM) activity by integrating it into a problematic situation.

El rápido desarrollo de la tecnología ha permitido que los educadores utilicen con frecuencia muchos tipos de tecnología en las actividades de aprendizaje y enseñanza. Una de estas tecnologías educativas de uso frecuente es Arduino. Este estudio tiene como objetivo determinar cómo cambia la resistencia según el área de la sección transversal, la longitud y la resistividad del conductor que usa Arduino. Para determinar los factores que afectan la resistencia en el experimento basado en Arduino, el experimento utilizó las minas de grafito que los estudiantes usan en su vida diaria. Se ha desarrollado un sistema experimental económico y de alta movilidad. Los datos obtenidos por la configuración experimental cumplen con las leyes teóricas. Este experimento, junto con el uso de Arduino, permitirá a los estudiantes experimentar la ley de Ohm y les permitirá comprender mejor los conceptos de potencial, corriente y resistencia en un circuito en serie. Además, se cree que el experimento atraerá más la atención de los estudiantes al ofrecer una oportunidad de aprendizaje respaldada por tecnología. Los investigadores y profesores pueden convertir este experimento en una actividad ciencia, tecnología, ingeniería y matemática (STEM) integrándolo en una situación problemática.

PACS: History of science (historia de la ciencia), 01.65.+g; physics education (enseñanza de la física), 01.40.-d; physics teaching methods (métodos de enseñanza de la física), 01.40.gb

### I. INTRODUCTION

With the swift developments in technology throughout the 21st century, the use of different types of technology in education and the integration of these technologies in lessons have come to the fore. The use of innovations that technology brings not only to our daily lives but also to our educational environments is increasing day by day. Today, many educational technologies with different features are used. Examples of these applications include augmented reality, mobile learning, wearable technology, holograms, digital storytelling, and digital games [1]. One of the technologies used in educational environments in Arduino. The fact that Arduino has a structure that is connected with many disciplines enables it to be easily integrated into educational environments. In particular, the fact that the software and hardware of such microcontroller cards are open-source, supported by block-based coded programs, and can grant access to many applications from the library without any coding knowledge ensure that Arduino-supported events are widely used in educational environments [2]. Also, the use of Arduino-style microcontrollers in education enables

students to create a model that they can touch and see, and with Arduino-supported robotic activities, students have the opportunity to examine events they encounter in daily life [3]. In addition, Arduino-supported robotics and coding applications teach students algorithmic thinking, collaborative work, creativity, and problem-solving, as well as the scientific method, programming, and engineering design processes [4].

Arduino is used as educational technology in physics experiments due to its low cost, flexible and easily applicable structure, and fast data collection advantages [5–7]. More accurate results can be obtained more quickly by using computer technologies for various measurements and calculations in science and physics laboratories. Such technologies can enable students to see concepts more visually. In addition, it has been determined that laboratory applications using computer technologies attract the attention of students more [8]. Students can quickly and easily collect and process experimental data with sensors connected to a microcontroller. Thus, students can focus most of their time and attention on interpreting data, rather than

collecting data, and creating graphs [9]. Arduino can be adapted to many different subjects in physics teaching. There are many application examples, including various Arduino-based physics experiments developed to measure physical quantities such as potential, temperature, and pressure [10]. Arduino can be used in many different learning environments and for diverse topics such as mechanics [11–13], electricity [14–16], heat and temperature [17, 18]. However, Arduino is mostly used in electricity and electronics teaching, due to its nature.

Electrical resistance in conductors appears in the science and physics curricula at secondary, high school, and university. Factors affecting resistance such as the length, type, and cross-sectional area of the conductor are examined, and experiments on these effects are widely carried out in schools. Thus, students can easily comprehend and apply these factors [7]. In this study, how the resistance changes depending on the cross-sectional area, type, and length of the conductor is modeled using Arduino. The experiment presented in this study consists of Arduino and materials we use in our daily lives. An inexpensive and easily portable system has been developed. In addition, the presented experiment can successfully attract the attention of students by providing a technology-supported teaching opportunity.

## II. ELECTRIC CURRENT AND RESISTANCE

Electricity is of interest not only to physics, but also to chemistry and biology. Today, the charging and discharging of our mobile phones is due to chemical reactions. The relationship between electricity and biology was first discovered by Luigi Galvani (1737–1798). While experimenting with frogs, Galvani noticed that electrical sparks caused the frogs' legs to twitch. As a result of this observation, Galvani made the wrong conclusion, arguing that there was electricity in the frog. Today, it is known that electrical currents are responsible for the transmission of messages between body muscles and the brain [19].

Physics teachers can make an analogy between water flow and current in lessons. For example, the amount of water leaving a faucet in a given time interval can be measured in units of liters per minute. Similarly, the flow of water in a river can be characterized by defining the speed with which water passes through a particular location. For example, the flow at the threshold of Niagara Falls varies between 1400 m<sup>3</sup>/s and 2800 m<sup>3</sup>/s [20].

To quantify current, it is assumed that the charges move perpendicularly through the cross-section of a wire. The current is defined as the rate at which the charge flows through this surface. If  $\Delta Q$  is the amount of charge passing through this surface in the time interval  $\Delta t$ , then the average current  $I_{avg}$  is equal to the charge passing through this surface per unit time [20]:

$$I_{avg} = \frac{\Delta Q}{\Delta t}. \quad (1)$$

If the flow rate of the charge changes over time, the current changes over time. Instantaneous current ( $I$ ) is defined as the

limit of the average current as follows:

$$I = \frac{dQ}{dt}. \quad (2)$$

The charged particles that make up the current can be positive, negative, or both. Traditionally, the direction of the current is the chosen direction of the positive particles. In conductors such as copper or aluminum, current results from the movement of negatively charged electrons. Therefore, in ordinary conductors, the direction of current is opposite to the direction of the flow of electrons. In some mediums, such as gas and electrolytes, the current is the result of the flow of both positive and negative charges [20].

It is possible to define the current with a second equation, by considering the flow in the conductor in the micro dimension. Assuming that the charges that make up the current move with the same drift velocity of magnitude  $V_d$ , in a time interval  $dt$ , each particle moves at a distance  $V_d$  times  $dt$ . If the conductor has a cross-sectional area  $A$  and each particle has a charge  $q$ , then the charge  $dQ$  flowing through the unit cross-section of the conductor during  $dt$  is [21]:

$$dQ = nqV_dAdt, \quad (3)$$

and the current is:

$$I = \frac{dQ}{dt} = nqV_dA. \quad (4)$$

The current per unit cross-sectional area is called the current density  $J$ :

$$J = \frac{I}{A} = nqV_d. \quad (5)$$

The current density  $J$  in a conductor depends on the electric field  $E$ , and the properties of the material. Overall, this relationship can be quite complex. However, for some materials, especially metals, at a given temperature  $J$  is almost directly proportional to  $E$ , and the ratio of  $E$  and  $J$  magnitudes is constant. This relationship, called Ohm's law, was discovered in 1826 by the German physicist Georg Simon Ohm (1787–1854). It defined the resistivity ( $\rho$ ) of a material as:

$$\rho = \frac{E}{J}. \quad (6)$$

The greater the resistivity, the greater the field needed to cause a given current density, or the smaller the current density caused by a given field. Materials that obey Ohm's law and thus show this simple relationship between  $E$  and  $J$  are said to be ohmic. However, it has been found experimentally that not all materials have this feature. It is said that those which do not obey Ohm's law are nonohmic [20]. Using the concept of potential difference ( $V$ ) in the resistivity equation, if we write  $V/L$  instead of  $E$ , and  $I/A$  instead of  $J$  and edit the equation, we write the following:

$$\frac{V}{I} = \rho \frac{L}{A}. \quad (7)$$

The  $V/I$  ratio gives the resistance ( $R$ ) of an ohmic conductor.  $R$  is equal to:

$$R = \rho \frac{L}{A}. \quad (8)$$

Based on this equation, it can be said that the resistance of a conductor depends on the length, cross-sectional area, and resistivity of the conductor.

### III. THE TRADITIONAL EXPERIMENT OF FACTORS AFFECTING RESISTANCE

Experiments about factors affecting the resistance of a conductor have been carried out in secondary schools, high schools, and universities for years. Traditional materials required for this experiment are a generator, voltmeter, ammeter, rheostat, and resistance board. There are thin wires such as copper, nickel, and iron in the resistance board. The diameter of the wires must be known in order to calculate their cross-sectional areas. In order to examine the relationship between the resistance of the conductor and its length, the potential difference is applied to two points of the same wire with different lengths. By measuring the current, the resistance of the same type of wire in different lengths is found. For the relationship between cross-section area and resistance, the current-potential difference measurement is made in three or four different diameters and fixed lengths of the same type of wire. Different types of wires with the same diameter are needed to investigate the dependence of the resistance of the conductor on the type of the conductor. Figure 1 shows the tools used in a traditional experiment.



Figura 1. Equipment for a traditional experiment about Ohm's law.

These experiment materials have low portability and can be difficult to provide. It is certain that the new generation of students, who are called the Z-generation, will not find this experiment set-up technological. Updating such experiments in a way that satisfies the curiosity and interest of students is a responsibility that every educator should undertake, if their goal is to provide meaningful learning.

### IV. NEW INTERPRETATION OF THE FACTORS AFFECTING RESISTANCE EXPERIMENT

This study aims to transform the experiment of factors affecting resistance into a more technology-supported format using Arduino Uno. The materials used in the experiment are as follows:

- Computer
- Arduino Uno
- $100\ \Omega$  resistor
- Jumper cables
- Graphite leads (0.3 mm, 0.5 mm, 0.7 mm, 0.9 mm)
- Copper wire (0.5 mm)

The expected learning outcomes of the students through the experiment are that they:

- Recognize the Arduino Uno board.
- Can use Arduino Uno input pins.
- Can connect two resistors in series.
- Apply Ohm's law.
- Analyze the variables on which resistance depends.

$$V_A = I(R_1 + R_2), \quad (9)$$

$$I = \frac{V_a}{R_1 + R_2}, \quad (10)$$

$$V_1 = IR_1, \quad (11)$$

$$V_1 = \frac{V_a}{R_1 + R_2} R_1, \quad (12)$$

$$R_1 + R_2 = \frac{V_a R_1}{V_1}, \quad (13)$$

$$R_2 = \frac{R_1(V_a - V_1)}{V_1}. \quad (14)$$

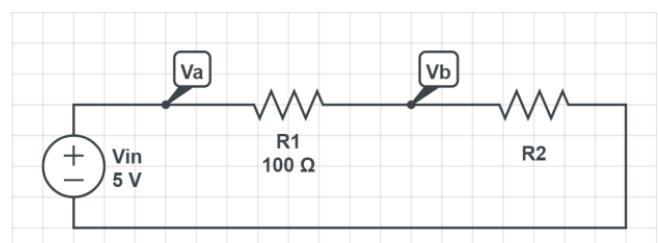


Figura 2. The circuit used in the experiment.

## V. EXPERIMENTAL SET-UP

Graphite leads are used as unknown resistance in this experiment. Graphite is one of the allotropes of carbon. It is used in writing due to its soft structure and black color. The graphite used in pencils is not pure and contains clay and wax. Depending on the graphite clay ratio, graphite leads are divided into two main grades as H and B. Grade H shows the hardness due to the higher clay content while grade B is for blackness due to the higher graphite content. Typically, HB-grade pencils contain 60-70 % graphite [22]. The use of graphite leads in electrical experiments and showing Ohm's law is a previously tested case [23, 24]. Presenting the experiment based on Arduino in this research is an attempt to attract the attention of today's students. Graphite leads are placed vertically on a breadboard, and these graphite leads are connected in series with  $100\ \Omega$  resistance. 5 V and GND outputs are used to create a potential difference in the circuit. A0 and A1 analog inputs are used to measure  $V_a$  and  $V_b$  potentials. The circuit diagram is given in Figure 3.

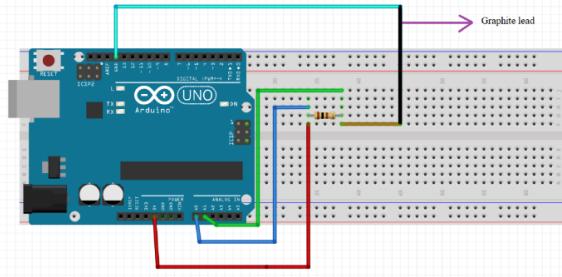


Figura 3. Arduino connection.

The Serial Port screen is used to read the collected data.

After the connections are made, the following codes are uploaded to Arduino:

```
float Va; // datatype of Va
float Vb; // datatype of Vb
float V1; // datatype of V1
void setup() {
Serial.begin(9600); // for communicating with
Serial Monitor
pinMode (A0,INPUT); // to define A0 as input
pin Mode (A1,INPUT); // to define A1 as input }
void loop() {
Va = analogRead (A0); // to read potential at point
Va
Va=(Va/1023)*5; // to convert ADC reading
toVoltage
Vb = analogRead (A1); // to read potential at point
Va
Vb= (Vb/1023)*5; // to convert ADC reading to
Voltage
V1=Va-Vb; // to calculate V1
float R2 = ((100*(Va-V1))/V1); // to define and
calculate R2
Serial.println (R2); // to print R2
delay (10000); // to wait for 10 seconds
```

## VI. DATA ANALYSIS

In order to investigate the relationship of resistance with the cross-sectional area of the conductor, different cross-sections of the same type of conductor with a constant length are required. For this, 6 cm long, 0.3 mm, 0.5 mm, 0.7 mm, 0.9 mm diameter graphite leads are used. Table VI gives graphite leads' resistances according to different diameters. Figure 4 presented the resistance cross-section graph created by the data in Table VI. Since the cross-section area is the product of the square of the radius ( $r^2$ ) and  $\pi$ ,  $r^2$  was used while drawing the graph. Figure 4 shows that the resistance is inversely proportional to the cross-section of the conductor.

Tabla 1. Resistance change with radius

Diameter (mm)	Square of radius (m <sup>2</sup> )	Resistance (Ω)
0.3	2.25E-08	102.08 ± 2.76
0.5	6.25E-08	66.72 ± 2.93
0.7	1.23E-07	31.02 ± 2.80
0.9	2.03E-07	12.36 ± 1.06

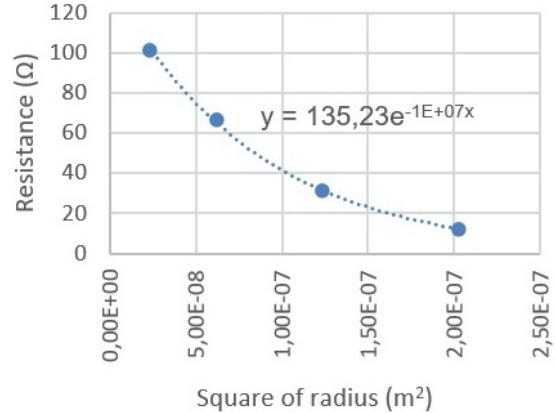


Figura 4. Relationship between resistance and  $r^2$ .

In order to investigate the relationship of resistance with the length of the conductor, it is necessary to measure different lengths of the same type of conductor with a fixed diameter. For this, 0.7mm diameter graphite lead was cut with scissors in 6 cm, 4.5 cm, 3 cm, and 1.5 cm lengths. Table VI gives the graphite lead's resistances of different lengths. Figure 5 presented the resistance-length graph created by the data in Table VI. According to Figure 5, as the length of the conductor increases its resistance increases, which is compatible with Ohm's law.

One of the factors affecting resistance is the type of conductor. To demonstrate this, two different conductors of the same length and diameter are needed. Copper wires inside telephone or internet cables can be used for this. The diameter of these wires is 0.5 mm. In Table 1, the resistance of 0.5 mm diameter and 6 cm long graphite was found to be  $66.72\ \Omega$ . The resistance of the 0.5 mm diameter 6 cm copper wire removed from the telephone cable was measured as  $0.21\ \Omega$ . In this measurement, the resistivity of the telephone wire was calculated as  $1.75 \times 10^{-6}\ \Omega \cdot \text{m}$ . The resistivity of copper is  $1.68 \times 10^{-6}\ \Omega \cdot \text{m}$ . Generally, cadmium-copper alloy is used in

telephone wires. This data shows us that the resistivity value of copper is lower than graphite. In other words, copper is a better conductor than graphite.

Tabla 2. Resistance change with length

Diameter (mm)	L (m)	(Ω)
0.7	0.060	$102.08 \pm 31.02 \pm 1.71$
0.7	0.045	$66.72 \pm 22.35 \pm 1.42$
0.7	0.030	$31.02 \pm 17.09 \pm 0.98$
0.7	0.015	$12.36 \pm 7.97 \pm 0.77$

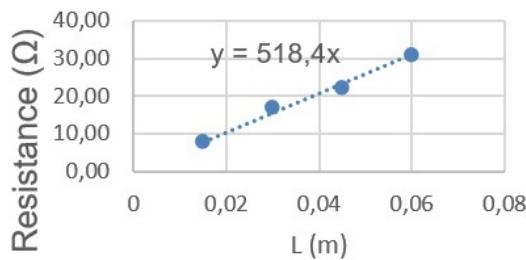


Figura 5. Relationship about resistance and length.

## VII. CONCLUSIONS

This study revised the factors affecting the resistance experiment that has been done in schools for years. The experiment of factors affecting resistance has been made available to students, teachers, and researchers in a technological, highly portable, and inexpensive way. The use of graphite leads as a material to measure resistance has been presented as a cheap and easily accessible material.

In addition, the fact that the materials are materials used by students in their daily lives can positively affect their science process skills. Prajoko et al. [25] stated that using local materials in students' science experiments improved their science process skills. Besides, the experiment presented by this study will also improve students' coding skills.

Educators who want to take the experience of their students further can include an LCD screen to the experimental set-up and enable students to read the values from this screen. Educators who do not want students to be busy with coding can upload the codes to Arduino before the lesson, and expect the students to focus only on the experiment. Researchers and teachers can try this experiment as a STEM activity and integrate it into a problem situation and use it in their classrooms.

## BIBLIOGRAPHY

- [1] L. Johnson, S. A. Becker, M. Cummins, V. Estrada, A. Freeman, C. Hall, NMC Horizon Report: 2016 Higher Education Edition. (2016).
- [2] M.A.Ocak, J. of Learning and Teaching in Digital Age, 3, 1 (2018).
- [3] N.K.Cakir, G. Guven, Science Activities-Projects and Curriculum Ideas in STEM Classrooms, 56, 2 (2019).
- [4] D. Alimisis, C. Kynigos, Constructionism and robotics in education. (2009)
- [5] K. Atkin, Phys. Educ. 51, 065006 (2016).
- [6] Pereira, N., Phys. Educ. 51, 065007 (2016).
- [7] U. Sari, T. Kirindi, J. Computer Educ. Res. 7, 14 (2019).
- [8] R.Cameron, "Mindstorms robolab: Developing science concepts during a problem based learning club", Master's thesis. The University of Toronto, 2005.
- [9] D. W. Russell, K.B. Lucas, C.J. McRobbie, Res. Sci. Educ. 33, 2 (2003).
- [10] Z. Gingl, J. Mellár, T. Szépe, G. Makan, R. Mingesz, G. Vadai, K. Kopasz, J. Phys. Conf. Ser. 1287, 012052 (2019).
- [11] W. C.Bensky, Phys. Teach. 56, 6 (2018).
- [12] El Hadi, M., et al., Phys. Educ. 55, 055027 (2020).
- [13] C.Galeriu, S. Edwards, G. Esper, Phys. Teach. 52, 3 (2014)
- [14] P. Brox, G. Huertas-Sánchez, A.López-Angulo, M. Álvarez-Mora, I. Haya, in 2016 Technologies Applied to Electronics Teaching (TAAE) (2016).
- [15] C. Holz, A. Push, A. Phys. Educ. 55, 025013 (2020)
- [16] N. Suwondo, D. Sulisworo, Int. J. Online Eng. 13, 1 (2017).
- [17] C. Galeriu, Phys. Teach. 56, 9 (2018).
- [18] R. Rahmatullah, S. Suparno, Jurnal Pendidikan Fisika Indonesia 16, 1 (2020).
- [19] R.A. Serway, J. S. Faughn, Physics. Harcourt Education Company (2006).
- [20] R.A. Serway, J.W. Jewett, Physics for Scientists and Engineers with Modern Physics. 9th Ed. (2014).
- [21] H.D. Young, R.A. Freedman, University Physics with Modern Physics. 15th Ed. (2020).
- [22] N. Kurra, G. U. Kulkarni, Lab. on a Chip 13, 2866 (2013).
- [23] L. D.Woolf, H. H. Streckert, Phys. Teach. 34, 440 (1996).
- [24] S. Derman, A. Goykadosh, Phys. Teach. 37, 400 (1999).
- [25] S. Prajoko, M. Amin, F. Rohman, M. Gipayana, Educ. Res. Int. 5, 4 (2016).

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.



# LA FÍSICA EN EL ORIGEN Y DESARROLLO DE LA TABLA PERIÓDICA

## PHYSICS IN THE ORIGIN AND DEVELOPMENT OF THE PERIODIC TABLE

E. PEDRERO-GONZÁLEZ<sup>a†</sup>, F. GÚZMAN-MARTÍNEZ<sup>b</sup>, C. RODRÍGUEZ-CASTELLANOS<sup>c</sup>

a) Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales, Universidad de La Habana, Cuba; edwin.pedrero@imre.uh.cu<sup>†</sup>

b) Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas, Universidad de La Habana, Cuba

c) Facultad de Física, Universidad de La Habana, Cuba

† autor para la correspondencia

Recibido 15/2/2021; Aceptado 2/6/2021

Se presenta una síntesis de las contribuciones más relevantes de la física a la evolución de la tabla periódica, con énfasis en los principales descubrimientos que tributaron a establecer los fundamentos físicos de la estructura atómica y su relación con las propiedades de los elementos químicos. En relación con cada descubrimiento se mencionan sus principales artífices, las condiciones que los propiciaron y su impacto en el desarrollo de la tabla periódica. Finalmente se comentan las posibilidades de emergencia de una tabla periódica de los núcleos atómicos.

PACS: History of science (historia de la ciencia), 01.65.+g; properties of atoms (propiedades de los átomos), 32.10.-f; electronic structure and bonding characteristics (estructura electrónica y características de los enlaces), 31.15.ae; nucleon distributions and halo features (distribuciones de nucleones y propiedades del halo), 21.10.Gv.

### I. INTRODUCCIÓN

La tabla periódica sintetiza un conjunto de regularidades en las propiedades químicas y físicas de los elementos, que se repiten periódicamente en función de una magnitud física característica de estos. Durante sus primeras décadas esa magnitud fue la masa atómica, luego el número atómico. Ese y otros cambios se debieron al progreso de los conocimientos sobre la estructura atómica de los elementos químicos.

En 1920, cuando la tabla periódica recién había cumplido medio siglo de existencia, seguían sin ser resueltos dos problemas relacionados con ella, planteados por Joseph J. Thomson (1856-1940) en 1904: cuál es la estructura del átomo y cuáles propiedades ésta le confiere al mismo [1]. En ese sentido, la tabla periódica continuaba desafiando las leyes de la física. Coincidientemente, ese año el neozelandés Ernest Rutherford (1871-1937) nombró protón [2] a una singular partícula descubierta por él en 1919, cuya cantidad en el núcleo atómico identifica a cada elemento y determina, como se esclareció después, su lugar en la tabla periódica.

Cien años después, la ley periódica, perfeccionada por el desarrollo de la física atómica y nuclear, sirve de guía para la búsqueda de nuevos elementos químicos y la creación de una tabla periódica de los núcleos atómicos [3,4].

En este artículo se resalta el papel desempeñado por la física en el origen y desarrollo de la tabla periódica, con énfasis en el tránsito de la sistematización de regularidades entre propiedades de los elementos, hacia la sistematización de regularidades en la estructura de los átomos.

A synthesis of the most relevant physics contributions to the evolution of the periodic table is presented, focusing on remarkable discoveries that contributed to establishing the physical foundations of the atomic structure and its relations with the chemical properties of the elements. The pathway of the discoveries, their main architects, and the conditions that led them to develop the periodic table are presented. Finally, the possibilities of the emergence of an atomic nucleus periodic table are briefly discussed.

Es una historia que abarca poco más que dos siglos, que comenzó en 1811 con la formulación de una hipótesis física que permitió medir sin ambigüedad la masa atómica de cada elemento.

### II. LA FÍSICA MOLECULAR Y LAS MASAS ATÓMICAS

La tabla periódica creada en 1869 por el químico ruso Dimitri Mendeléiev (1834-1907) con el nombre de "Ensayo de un sistema de los elementos basado en su peso atómico y semejanza química" [5], surgió estrechamente ligada a la medición de las masas atómicas.

Pero a inicios del siglo XIX no había consenso sobre cómo determinar las proporciones que guardan entre sí los átomos de los diferentes elementos presentes en las moléculas de una sustancia compuesta. Eso impedía medir sin ambigüedad las masas atómicas, de modo que a un mismo elemento se atribuían diferentes masas atómicas. En ese contexto, basado en estudios del químico y físico francés Joseph Gay-Lussac (1778-1850) sobre las proporciones de los volúmenes de gases antes y después de una reacción química, el físico italiano Amedeo Avogadro (1776-1856) formuló en 1811 la siguiente hipótesis: "Bajo las mismas condiciones de presión y temperatura, en volúmenes iguales de gas hay igual número de moléculas" [6]. Con ayuda de esa hipótesis concluyó, por ejemplo, que la molécula de agua está compuesta por dos átomos de hidrógeno por cada átomo de oxígeno, a diferencia de lo que creía John Dalton (1766-1844), de que la proporción entre esos átomos era 1:1.

La aplicabilidad de la hipótesis de Avogadro para medir los pesos atómicos fue demostrada en 1858 por el químico italiano Stanislao Cannizzaro (1826-1910), quien la expuso en el Primer Congreso Internacional de Química (Karlsruhe, 1860), al que asistieron Mendeléiev y otros químicos notables [7].

Así, la física contribuyó a sentar las bases para ordenar los elementos según su peso atómico y Mendeléiev pudo crear en 1869 la tabla que lleva su nombre.

### III. EL “PUDÍN CON PASAS” Y LA TABLA PERIÓDICA

El modelo atómico de J. J. Thomson, conocido como del “pudín con pasas”, generalmente es subestimado porque no refleja la estructura nuclear del átomo. Menos conocido es que con ese modelo describió, por primera vez, algunas regularidades de la tabla periódica en función de la estructura atómica.

En su famoso artículo de 1904, Thomson escribió: “Suponemos que el átomo consiste de un número de corpúsculos en movimiento en una esfera de carga eléctrica positiva uniforme: los problemas que tenemos que resolver son (1) cuál debe ser la estructura de ese átomo, i.e. cómo están distribuidos los corpúsculos en la esfera; y (2) cuáles propiedades confiere esa estructura al átomo...”[1].

Lo esencial de ambos problemas, el conocimiento de la estructura atómica y su correspondencia con las propiedades de los elementos, guió las contribuciones de la física al desarrollo de la ley periódica de éstos.

El propio Thomson fue el primero en intentar resolver ambos problemas, como ilustra la cita siguiente: “... me esforzaré en demostrar que las propiedades conferidas al átomo por su estructura de anillos son análogas en muchos aspectos a las que poseen los átomos de los elementos químicos, y que en particular las propiedades del átomo dependerán de su peso atómico de manera análoga a la expresada en la ley periódica” [1].

En 1907, año en que muere Mendeléiev, Thomson profundiza en la aplicación de su modelo para comprender semejanzas entre la distribución periódica de los electrones y propiedades periódicas de los elementos: “Si asumimos que el peso atómico es proporcional al número de corpúsculos contenidos en sus átomos, -y daremos más tarde evidencias en favor de este punto de vista- podemos ver la semejanza entre propiedades de esas distribuciones de corpúsculos en la misma columna vertical y propiedades notables de los elementos químicos, i.e., las propiedades expresadas por la ley periódica.” [8].

Sobre la base de ese modelo, relacionó algunas propiedades periódicas de los elementos con la cantidad de electrones en la órbita externa. Ello sirvió de base a Niels Bohr (1885-1962) para elaborar su teoría de la estructura atómica [9, 10]. En particular, para distribuir los electrones “...en anillos cerrados semejantes a la estructura de conchas originalmente introducidas por Thomson en su temprano intento de explicar con su modelo atómico las periodicidades características de la tabla de los elementos de Mendeléiev.” [11].

No es común valorar esa arista del modelo del “pudín con pasas”, a pesar de su trascendencia para comprender desde la física por qué en la tabla periódica los elementos están ordenados de cierta manera y no de otra.

### IV. DE LA MASA ATÓMICA AL NÚMERO ATÓMICO

Entre 1909 y 1919 convergieron para transformar la tabla periódica numerosos descubrimientos que fueron la saga del descubrimiento de los rayos X, la radiactividad, el electrón y los cuantos de luz.

En 1909, los físicos Hans Geiger (1882-1945) y Ernest Marsden (1889-1970) realizaron el famoso experimento de bombardear una lámina de oro con partículas alfa. Como resultado del mismo, en 1911 Rutherford propuso el modelo nuclear del átomo [12]. Lo esencial del modelo, que toda la carga positiva y casi toda la masa del átomo están contenidas dentro de una pequeña región central, mientras que los electrones se mueven alrededor de ésta, se ha mantenido en todos los modelos atómicos posteriores.

Una repercusión inmediata de ese modelo fue la hipótesis hecha por el físico holandés Antonius van den Broek (1870-1926) de que al núcleo atómico de cada elemento corresponde un número entero de unidades de carga eléctrica iguales a la del núcleo de hidrógeno [13]. Esta hipótesis marcó el inicio de la sustitución del peso atómico por el número atómico en la tabla periódica.

En el año 1913 convergieron en beneficio de la tabla periódica varias investigaciones físicas que venían realizando en campos diferentes Bohr, Henry Moseley (1887-1915) y Francis Aston (1887-1945).

Ese año Bohr publicó tres artículos con un título común que no pudo ser mejor elegido: “Sobre la constitución de átomos y moléculas” [10,14,15]. En esa trilogía hace referencia a trabajos de Thomson, Rutherford, Broek, Max Planck (1858-1947), Albert Einstein (1879-1955) y John Nicholson (1881-1955), entre otros físicos.

Por su parte, Moseley [16, 17] midió las frecuencias de radiación X emitida por átomos de varios elementos y tomó en cuenta la hipótesis de Broek. Esto le permitió asumir que “el número entero que controla el espectro de rayos X es la misma cantidad de unidades eléctricas en el núcleo” [17] y correlacionar la cantidad de cargas iguales a la del núcleo de hidrógeno que hay en el núcleo atómico de cualquier elemento con las frecuencias de las líneas K y L de los rayos X emitidos por los átomos de ese elemento. Con eso, al decir de Aston, hizo “la generalización más importante en la historia de la química desde la Ley Periódica de Mendeléiev” [18].

Simultáneamente, como consecuencia de más de una década de investigaciones en el campo de la radiactividad, el químico inglés Frederick Soddy (1877-1956) fundamentó su hipótesis sobre la existencia de átomos con diferentes masas atómicas que ocupan el mismo lugar en la tabla periódica, a los que llamó isótopos [19].

Por ese tiempo, Thomson descubrió una anomalía en el peso atómico del neón que no encontró explicación hasta 1919,

cuando Aston demostró la existencia de dos isótopos del neón con pesos atómicos de 20.00 y 22.00 respectivamente [18]. Despues de eso, entraron los isótopos a formar parte de la tabla periódica.

También en 1919, sucesivos experimentos que siguieron al de la lámina de oro bombardeada por partículas alfa, derivaron en dos descubrimientos trascendentales para la física en general, y en particular para la tabla periódica [20]: 1) la primera reacción nuclear artificial, antecesora de las que han contribuido a ampliar la tabla periódica mediante síntesis nuclear y 2) el descubrimiento del protón, cuya cantidad en el núcleo atómico coincide con el número atómico del elemento y es la razón física de que ese número sea entero.

Esos conocimientos acumulados hasta 1919 fueron imprescindibles para formular la tabla periódica en función de la estructura atómica en la década siguiente.

## V. LA FÍSICA CUÁNTICA: DE LAS PROPIEDADES A LA ESTRUCTURA

Hasta 1920 sólo en el elemento más ligero habían sido resueltos satisfactoriamente los dos problemas fundamentales planteados por Thomson en 1904. Para logarlo, Bohr postuló en 1913 que el único electrón del átomo de hidrógeno sólo podía moverse en órbitas con radios discretos, asociados con un número entero que está relacionado con la emisión y absorción cuántica de luz.

Aunque entonces introdujo elementos de física cuántica para explicar propiedades atómicas y relacionó la periodicidad de algunas propiedades de los elementos con la distribución de los electrones en los átomos, advirtió que "La teoría, sin embargo, no es suficientemente completa para dar una respuesta definitiva a tales problemas" [14]. Estaba por ser creada una teoría de la estructura atómica consistente con las propiedades químicas de los elementos.

Ocho años después, en marzo de 1921, Bohr publica un artículo titulado *Atomic Structure* [21] en el cual expone sus ideas principales de una teoría atómica basada en nociones cuánticas, compatible con propiedades periódicas de diversos elementos. Distribuye los electrones conforme a números cuánticos y relaciona la distribución electrónica con grupos y períodos de la tabla periódica. Ilustra sus conclusiones con el grupo de los gases nobles y la familia de las tierras raras.

Al año siguiente, al recibir el premio Nobel de Física, diserta sobre el mismo tema. En su conferencia *The structure of the atom* [11], relacionó cada período de la tabla periódica con la existencia de electrones en la capa atómica exterior. Los átomos de los elementos del n-simo período tienen electrones en la capa n-sima: los del primer período (H y He) tienen electrones sólo en la primera capa; los del segundo período (Li,..., Ne) poseen electrones externos en la segunda capa, y así sucesivamente.

Además, resumió en una tabla la estructura electrónica de 42 elementos [11] entre los cuales incluyó dos que entonces no habían sido descubiertos: los de número atómico Z = 87 y Z = 118. Para ambos predijo las cantidades de electrones en

cada una de las siete capas de los átomos, que coinciden con las determinadas hoy por la física cuántica para esos elementos: 2, 8, 18, 32, 18, 8, 1 para el primero y 2, 8, 18, 32, 32, 18, 8 para el segundo.

Esa sistematización lograda por Bohr en 1922 marcó un "antes" y un "después" para la tabla periódica de los elementos. Dejó de ser una tabla que relacionaba regularidades en las propiedades de los elementos, para expresar regularidades en la estructura electrónica, las cuales a su vez dependen de la cantidad de protones en el núcleo.

No sin razón, el austriaco Wolfgang Pauli (1900-1958) reconoció que había comenzado una nueva fase de su vida científica cuando asistió a una serie de conferencias que dio Bohr en 1922 acerca de sus investigaciones teóricas sobre el sistema periódico de los elementos [22].

Cuando en 1924 Pauli trataba de explicar el desdoblamiento de las líneas espectrales en el efecto Zeeman anómalo en los metales alcalinos (el caso más simple, porque son elementos con un solo electrón en la última capa) el físico inglés Edmund Stoner (1899-1968) advirtió que, para un número cuántico principal dado, la cantidad de niveles energéticos, en los espectros de metales alcalinos de un electrón aislado en un campo magnético externo, es igual a la cantidad de electrones en la capa cerrada del mismo número cuántico principal en los gases nobles [22]. Considerando eso, Pauli formula en 1925 la existencia de un cuarto número cuántico y el principio de exclusión que lleva su nombre [23].

Paralelamente, en 1922, los físicos alemanes Otto Stern (1888-1943) y Walther Gerlach (1889-1979) observaron la deflexión de un haz de átomos de plata en un campo magnético no homogéneo. La interpretación de este resultado condujo al alemán Ralph Kronig (1904-1995) e, independientemente, a los holandeses George Uhlenbeck (1900-1988) y Samuel Goudsmit(1902-1978) a proponer en 1925 la existencia del espín del electrón, un momentum angular intrínseco, cuya proyección puede tomar los valores  $s_z = \pm \hbar/2$ .

Con la inclusión del espín, se fundamentó el cuarto número cuántico (grado de libertad con dos valores posibles) que había sido postulado poco antes por Pauli para caracterizar completamente los estados electrónicos y explicar el efecto Zeeman anómalo. Las reglas para la ocupación de estos estados en los átomos multielectrónicos se construyeron con ayuda del principio de exclusión de Pauli, que prohíbe las configuraciones en que dos o más electrones tengan sus cuatro números cuánticos iguales.

La Mecánica Cuántica desarrollada a partir de 1925 por Werner Heisenberg (1901-1976), Erwin Schrödinger (1887-1961), Paul Dirac (1902-1984) y otros, colocó todos los descubrimientos anteriores sobre la estructura atómica en un nuevo marco conceptual.

Además, proporcionó un procedimiento sistemático y completo para determinar la estructura electrónica de cualquier átomo, conocida la energía potencial de interacción de los electrones con el núcleo atómico y entre sí. Para ello hay que resolver la ecuación de Schrödinger, lo cual permite,

en principio, calcular la energía y predecir la ocupación de los estados electrónicos, calcular sus funciones de onda, la probabilidad de las transiciones que ocurren cuando el átomo emite o absorbe radiación electromagnética y los cambios de estructura motivados por campos eléctricos o magnéticos externos. Para los átomos con gran cantidad de electrones se han desarrollado métodos aproximados mucho más eficientes que la ecuación de Schrödinger, como el del funcional de la densidad electrónica, que combinado con el cálculo numérico y la computación permiten determinar la estructura electrónica de átomos y moléculas de gran complejidad [24].

La clasificación de las estructuras con los números cuánticos propuestos por Bohr y Pauli se obtiene en la aproximación más simple, suponiendo que sobre cada electrón actúa un potencial efectivo que tiene simetría esférica. Cuando se incorporan los efectos de muchos cuerpos y consideraciones relativistas, es posible explicar y predecir cuantitativamente hasta los más mínimos detalles de los espectros atómicos, como la estructura fina e hiperfina y el corrimiento de Lamb [24].

Los avances de la física cuántica han permitido predecir que la distribución electrónica de los átomos del último elemento conocido, el oganesón (Og), que tienen 118 protones en sus núcleos, es  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 6s^2 5d^{10} 6p^6 5f^{14} 6d^{10} 7s^2 7p^6$ . Es el último elemento del séptimo período de la tabla periódica [24]. Aún no se ha podido determinar experimentalmente su estado y se estima que a temperatura ambiente debe ser sólido, no un gas inerte, como todos los demás elementos de ese grupo en la tabla periódica. Pero es esa distribución electrónica la que determina en última instancia su posición en la tabla periódica.

En 1925, cuando Pauli establecía el principio de exclusión y se desarrollaba la Mecánica Cuántica, fue descubierto el renio (Re). Se conocían entonces 88 elementos. Hoy se conocen 30 más, todos descubiertos mediante reacciones nucleares producidas en laboratorios. Entre 1937 y 1947 se descubrieron cuatro (Tc, Fr, At, Pm), que ocupan espacios entre hidrógeno y el uranio. Los otros 26 son transuránicos. El completamiento y la ampliación de la tabla periódica con esos 30 elementos también han sido contribuciones de la física, en particular de la física nuclear.

Hoy se prepara el camino para obtener elementos superpesados pertenecientes al octavo período de la tabla periódica, incluidos los de una nueva familia de elementos que, por primera vez, contendrán electrones en los orbitales  $5g$  [25]. Como suele suceder en la ciencia, la última palabra no está dicha, y el estudio de las propiedades químicas de nuevos superelementos pudiera traer nuevas incógnitas sobre la tabla periódica y nuevos desafíos para la física.

## VI. HACIA UNA TABLA PERIÓDICA NUCLEAR

Sobre bases físicas, actualmente se desarrolla una tabla periódica que sistematice propiedades periódicas de los núcleos atómicos, no del átomo como un todo. Entre esas propiedades, se presta especial atención a la periodicidad en

la mayor estabilidad de unos núcleos respecto a otros. Esta nueva tabla no se rige por la distribución de los electrones en el átomo, sino por la distribución de los nucleones (protones y neutrones) en los núcleos atómicos. En ese sentido, se trata de una tabla periódica nuclear [3,4].

La tabla periódica que cumplió 150 años y esta nueva tabla, son cualitativamente diferentes, aunque tienen entre sí algunas (pocas) semejanzas, derivadas de que tanto los electrones como los nucleones son fermiones, partículas con espín  $\frac{1}{2}$ , que obedecen al principio de exclusión de Pauli. Unos en la nube electrónica y los otros dentro del núcleo pueden ser distribuidos en capas, subcapas y orbitales relacionados con números cuánticos.

En unos y otros el momento angular total de cualquiera de esas partículas es la suma de su momento orbital y su spin, entre otras similitudes [4]. Pero entre ambas tablas hay diferencias notables, porque la naturaleza y la escala (energética y espacial) de las fuerzas nucleares, entre protones y neutrones en el núcleo, difieren sustancialmente de las electromagnéticas, entre los electrones y entre éstos y el núcleo. Consecuentemente, las reglas de distribución de los protones y neutrones en el núcleo, y de los electrones alrededor de este último, son diferentes y una tabla no sustituye a la otra.

En la tabla periódica de los elementos, los que tienen número atómico 2, 10, 18, 36, 54, 86, 118 son todos inertes, químicamente estables y se pueden agrupar en la columna final de cada período. En ellos están llenas sus capas electrónicas. Análogamente, en una tabla periódica nuclear los elementos con "número mágico" de protones 2, 8, 20, 28, 50, 82 y 114 también se pueden colocar en una columna al final de siete períodos. Estos también son muy estables [4] y tienen llenas sus capas protónicas.

Ordenar los elementos según las propiedades y la estructura de sus núcleos, se complejiza por la presencia de los neutrones y la naturaleza de las interacciones en la escala del núcleo atómico. También hay "números mágicos" de neutrones, que corresponden a núcleos con sus capas neutrónicas llenas. Por esas y otras razones aún no hay consenso en la manera de ordenar los elementos en la tabla periódica nuclear, aunque han existido varios intentos en este empeño [3,4].

Teóricamente pueden existir "islas de estabilidad" dentro del "mar de inestabilidad" en el "mapa" de los isótopos conocidos y predichos. En la "isla" más próxima al oganesón ( $Z = 118$ ), se ha predicho la posibilidad de que el elemento con  $Z = 126$  tenga suficiente cantidad de neutrones que compensen la repulsión de los protones y de esa forma se garantice una relativa estabilidad.

La búsqueda de elementos superpesados continúa, aprovechando los avances de la física nuclear y de los aceleradores de partículas. Al mismo tiempo, se desarrollan modelos que cada vez describen mejor la estructura del núcleo atómico y las propiedades que ésta le confiere al mismo. En ese sentido, la física está hoy ante un desafío análogo al que tuvo hace cien años, cuando estaban por ser resueltos los dos problemas formulados por Thomson en relación con la

estructura atómica y la tabla periódica de Mendeléiev.

## VII. CONCLUSIONES

La física contribuyó a crear algunas de las condiciones necesarias para la creación de la tabla periódica por Mendeléiev en 1869 y no ha cesado de contribuir a su progresiva evolución. Desde hace casi cien años, la posición de los elementos en la tabla periódica obedece a la estructura atómica descrita por leyes físicas. Hoy se avanza hacia el descubrimiento de superelementos del octavo período de la tabla periódica y el establecimiento de una tabla periódica de los núcleos atómicos.

## REFERENCIAS

- [1] J. J. Thomson, Phil. Mag. **7**, 237 (1904).
- [2] O. Lodge, Nature **106**, 467 (1920).
- [3] A.B. Wieckowski, Rom. J. Phys. **64**, 303 (2019).
- [4] K. Hagino and Y. Maeno, A nuclear periodic table, Foundations of Chemistry, (2020) Published online, 21 April 2020, Springer.
- [5] A. Yu. Tsivadse, RFBR Jour. **101**, 10 (2019).
- [6] A. Avogadro, Jour. de Physique **73**, 58 (1811). (<http://lem.ch.unito.it/chemistry/essai.html>)
- [7] P. Román Polo, An. Quím. **106**, 231 (2010).
- [8] J. J. Thomson, The corpuscular theory of matter. (Charles Scribner's Sons, New York, 1907), p. 113.
- [9] N. Bohr, Essays 1958-1962 on Atomic Physics and Human Knowledge (Interscience Publishers, John Wiley & Sons, New York, London, 1963), p. 43.
- [10] N. Bohr, Phil. Mag. **26**, 1 (1913).
- [11] N. Bohr, "The structure of the atom", Nobel Lecture, 1922.
- [12] E. Rutherford, Phil. Mag. Series 6 **21** 669 (1911).
- [13] A. Van den Broek, Nature **87** 78 (1911).
- [14] N. Bohr, Phil. Mag. **26**, 476 (1913).
- [15] N. Bohr, Phil. Mag. **26**, 857 (1913).
- [16] H. G. J. Moseley, Phil. Mag. **26**, 1024 (1913).
- [17] H. G. J. Moseley, Phil. Mag. **27**, 704 (1914).
- [18] F. W. Aston, Isotopes, (London, Edward Arnold & Co., 1922).
- [19] F. Soddy, Nature **92**, 399 (1913).
- [20] E. Rutherford, Phil. Mag. **37**, 581 (1919).
- [21] N. Bohr, Nature **107**, 104 (1921).
- [22] W. Pauli, "Exclusion principle and quantum mechanics", Nobel Lecture, 1946.
- [23] W. Pauli, Z. Physik **31**, 765 (1925).
- [24] R. M. Macrae and T. J. Kemp, Science Progress **101**, 101 (2018).
- [25] Yu. Ts. Oganessian, RFBR Jour. **101**, 57 (2019).

---

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.



# EXPLORANDO LOS AGUJEROS NEGROS

## EXPLORING BLACK HOLES

J. PINOCHET

Departamento de Física, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad Metropolitana de Ciencias de la Educación, Santiago, Chile; jorge.pinochet@umce.cl  
† autor para la correspondencia

Recibido 20/2/2021; Aceptado 4/6/2021

El objetivo de este artículo es presentar una introducción no técnica a la física de los agujeros negros. Se discuten las principales propiedades de los cuatro tipos de agujero negro permitidos por el teorema de ausencia de pelo, y se examinan geométricamente algunas propiedades del espacio-tiempo alrededor de un agujero negro utilizando diagramas de inmersión.

PACS: Física de los agujeros negros (physics of black holes), 04.70.-s; agujeros negros clásicos (classical black holes), 04.70.Bw; relatividad general clásica (classical general relativity), 04.20.-q.

### I. INTRODUCCIÓN

Los agujeros negros, predichos por la teoría de la relatividad general hace más de un siglo, han fascinado durante mucho tiempo a especialistas y legos con sus sorprendentes propiedades, lo que sin duda ha contribuido a su enorme popularidad. La primera imagen de un agujero negro difundida en 2019 por la colaboración EHT, y el premio nobel de física 2020 otorgado a Roger Penrose, Reinhard Genzel y Andrea Ghez por sus importantes descubrimientos sobre los agujeros negros [1], han incrementado aún más la popularidad de estos objetos, despertando el interés de personas que nunca se habían acercado a este tema. Parece oportuno aprovechar este favorable escenario para invitar a un público lo más amplio posible a descubrir los secretos de los agujeros negros.

El objetivo de este trabajo es explorar algunos aspectos básicos de la física de los *agueros negros clásicos*, que son aquellos que se describen únicamente en el marco de la relatividad general. El artículo está dirigido a aquellos lectores que dominan los fundamentos de la física y el álgebra, y que están familiarizados con la física relativista.

El tema que abordaremos es muy amplio, lo que nos obliga a ser selectivos. Por tanto, este trabajo no pretende ofrecer un análisis pormenorizado de la física de los agujeros negros, sino que solo busca convertirse en una breve introducción que sirva de guía y complemento para lecturas más profundas. Un tema importante que omitiremos son los agujeros negros cuánticos, que son aquellos cuya descripción requiere conciliar la relatividad general y la teoría cuántica. Para aquellos lectores que deseen ahondar en este tema, en dos artículos recientes el autor ha analizado las propiedades cuánticas de los agujeros negros [2,3].

El artículo está organizado del siguiente modo. En la primera parte se presenta una breve introducción al concepto de agujero negro clásico. Luego se analizan las propiedades de los distintos tipos de agujeros negros predichos por la

The objective of this work is to present a non-technical introduction to black hole physics. The main properties of the four types of black hole allowed by the no-hair theorem are discussed, and some properties of spacetime around a black hole are geometrically examined using embedding diagrams.

relatividad general. Después se examinan geométricamente las propiedades del espacio-tiempo alrededor de un agujero negro. El artículo finaliza con unos breves comentarios.

### II. AGUJEROS NEGROS CLÁSICOS

Los agujeros negros son un tipo de solución matemática exacta a las ecuaciones de la relatividad general, que es la teoría de la gravedad propuesta por Einstein en 1916 para perfeccionar y ampliar la ley de gravedad de Newton. Sin embargo, se ha encontrado que dicha solución matemática describe objetos que existen en el universo real, como el agujero negro supermasivo "fotografiado" por la colaboración EHT.

Podemos definir un agujero negro como una región del espacio-tiempo que contiene una concentración tan elevada de materia, que nada puede escapar de su gravedad, ni siquiera la luz [4]. Un agujero negro es un objeto muy simple si se le compara, por ejemplo, con una enana blanca o una estrella de neutrones, con las cuales comparte el hecho de ser *objetos compactos*, como se conoce a los cuerpos celestes caracterizados por una elevada concentración de materia.

Esta simplicidad se explica en base al *teorema de ausencia de pelo*, un resultado de la relatividad general que establece que existen solo tres parámetros clásicos observables externamente que definen un agujero negro: masa  $M$ , carga eléctrica  $Q$ , y momentum angular  $J$ . Esto significa que clásicamente existen solo cuatro tipos de agujero negro, que llevan los nombres de los físicos que encontraron las correspondientes soluciones a las ecuaciones de la relatividad general [4,5]: (1) el agujero negro de Schwarzschild, que solo depende de  $M$ ; (2) el de Reissner-Nordstrom, que depende de  $M$  y  $Q$ ; (3) el de Kerr, que depende de  $M$  y  $J$ ; y el más general, (4) el de Kerr-Newman, que depende de  $M$ ,  $J$  y  $Q$ . En las siguientes secciones analizaremos por separado estos objetos.

### III. AGUJERO NEGRO DE SCHWARZSCHILD

La primera solución exacta a las ecuaciones de la relatividad general para lo que hoy en día denominamos agujero negro, fue encontrada por el astrónomo alemán Karl Schwarzschild en 1916 [6]. Para comprender intuitivamente el significado de esta solución matemática, imaginemos un objeto esférico de masa  $M$  y radio  $r$ . En la medida que  $r$  se reduce, la gravedad del objeto se incrementa más y más, hasta que llega un momento en que su densidad es tan grande, que ni siquiera la luz puede escapar de su gravedad. El valor crítico que debe tomar  $r$  para que esto ocurra se denomina *radio de Schwarzschild* y se calcula mediante la ecuación<sup>1</sup> [5]:

$$R_S = \frac{2GM}{c^2} \simeq 1,48 \times 10^{-27} m \left( \frac{M}{kg} \right), \quad (1)$$

donde  $G = 6.67 \times 10^{-11} N \cdot m^2 \cdot k^{-2}$  es la constante de gravitación y  $c = 3 \times 10^8 m \cdot s^{-1}$  es la rapidez de la luz en el vacío. Pero según la relatividad general, el objeto no puede mantenerse estático en su radio de Schwarzschild, pues la gravedad que ejerce sobre sí mismo es tan poderosa, que sobreviene un colapso que ninguna fuerza conocida puede detener. El colapso gravitacional termina cuando toda la masa queda reducida a un punto matemático de densidad infinita conocido como *singularidad*, localizado en el centro de la esfera de radio  $R_S$ ; por definición, en ese momento se ha formado un agujero negro. La esfera de radio  $R_S$  se denomina *horizonte* y define el límite que separa al agujero negro del resto del universo. Un observador externo solo puede ver lo que sucede fuera del horizonte. La Fig. 1 muestra la estructura interna de un agujero negro de Schwarzschild, también conocido como *agujero negro estático*, donde se aprecia que tiene simetría esférica.

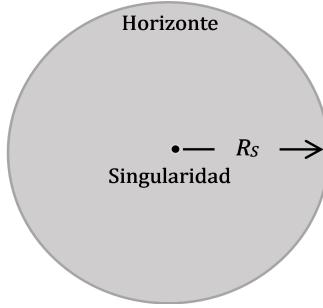


Figura 1. Estructura interna de un agujero negro de Schwarzschild.

Un objeto que esté fuera del horizonte puede escapar de la gravedad del agujero negro si tiene suficiente energía, pero si se encuentra dentro del horizonte, quedará causalmente desconectado del exterior, e inevitablemente será absorbido por la singularidad. Aunque el horizonte no tiene existencia material, puede imaginarse como una membrana unidireccional que solo permite el flujo de materia y energía del exterior al interior, pero nunca en sentido contrario.

Para tener una idea de las colosales concentraciones de masa, o de su equivalente en energía, implicadas en la formación de

un agujero negro, notemos que si en la ecuación (1) tomamos la masa terrestre,  $M = 5,97 \times 10^{24} kg$  se obtiene  $R_S \simeq 9 mm$  que es el tamaño de una canica.

Es importante hacer notar que si bien, de acuerdo con la Fig. 1,  $R_S$  representa la distancia radial desde la singularidad hasta el horizonte, cerca de un agujero negro y en su interior las distancias radiales son solo parámetros y no tienen el significado físico que les atribuimos en nuestra experiencia directa. Por tanto, la Fig. 1 solo tiene un valor pedagógico y no debe considerarse una representación exacta de la realidad. Esto también es válido para las figuras que usaremos en las siguientes secciones para representar la estructura interna de los otros tipos de agujero negro. Estas ideas quedarán más claras cuando lleguemos a la Sección VII.

### IV. AGUJERO NEGRO DE REISSNER-NORDSTROM

Poco tiempo después de que Schwarzschild encontrara la solución que lleva su nombre, los físicos Hans Reissner y Gunnar Nordstrom descubrieron, en forma independiente, una solución a la ecuación de Einstein que representa el espacio tiempo de un agujero negro cargado eléctricamente [4,5]. La estructura de un agujero de Reissner-Nordstrom es más compleja que la de un agujero de Schwarzschild, pues tiene dos horizontes esféricos concéntricos, uno interno y otro externo. Al igual que en la solución de Schwarzschild, un observador en el exterior solo puede ver lo que sucede fuera del horizonte externo. Para un agujero de Reissner-Nordstrom con carga  $Q$ , el radio del horizonte externo es [5]:

$$R_+ = \frac{GM}{c^2} + \sqrt{\frac{G^2 M^2}{c^4} - \frac{G Q^2}{4 \pi \varepsilon_0 c^4}}, \quad (2)$$

donde  $\varepsilon_0 = 8,85 \times 10^{-12} C^2 \cdot N \cdot m^{-2}$  es la permitividad del vacío. El radio del horizonte interno es:

$$R_- = \frac{GM}{c^2} - \sqrt{\frac{G^2 M^2}{c^4} - \frac{G Q^2}{4 \pi \varepsilon_0 c^4}}. \quad (3)$$

Se aprecia que  $R_+ \geq R_-$ . Estas dos ecuaciones pueden sintetizarse como:

$$R_{\pm} = \frac{R_S}{2} \pm \sqrt{\frac{R_S^2}{4} - \frac{G Q^2}{4 \pi \varepsilon_0 c^4}}, \quad (4)$$

donde hemos introducido la ecuación (1). Para  $Q = 0$ , el agujero de Reissner-Nordstrom se convierte en uno de Schwarzschild, ya que  $R_- = 0$  y  $R_+ = R_S$ . Al igual que en la solución de Schwarzschild, la singularidad central es un punto matemático. La Fig. 2 representa la estructura interna

<sup>1</sup>Existe un argumento newtoniano intuitivo para obtener la ecuación (1). Si consideramos un objeto masivo de radio  $R$  y masa  $M$ , la velocidad de escape desde su superficie viene dada por  $V_e = (2GM/R)^{1/2}$ . Si tomamos  $V_e = c$ , y resolvemos para  $R$  se obtiene:  $R = 2GM/c^2$ . El significado físico de esta expresión es claro: ninguna forma de materia o energía contenida dentro de la superficie esférica limitada por  $R$  puede escapar, ya que para ello necesitaría una rapidez mayor que  $c$ .

de un agujero negro de Reissner-Nordstrom. Se aprecia que este objeto tiene simetría esférica.

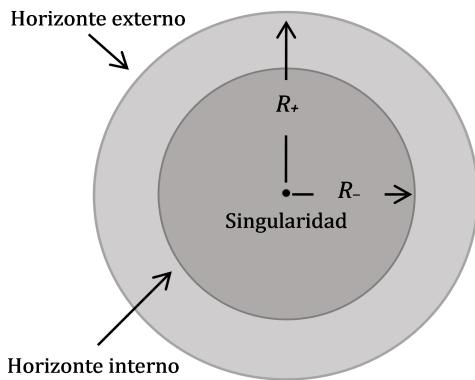


Figura 2. Estructura interna de un agujero negro de Reissner-Nordstrom.

Intuitivamente es evidente que  $Q$  no puede aumentar indefinidamente, pues la carga provoca un efecto repulsivo que se opone a la gravedad. Si la repulsión eléctrica superara a la gravedad, el agujero negro desaparecería, y en su lugar se formaría una singularidad desnuda, carente de horizonte. Por razones teóricas, se presume que no pueden existir singularidades desnudas. Esta conjetura se denomina *censura cósmica*, y fue formulada por Penrose en 1969.

A partir de la ecuación (4) podemos calcular la carga máxima que puede tener un agujero de Reissner-Nordstrom. Como la cantidad subradical no puede hacerse negativa, la carga máxima se calcula haciendo que dicha cantidad se anule:

$$Q_{max} = 2\sqrt{\pi\varepsilon_0 GM} \approx 8,6 \times 10^{-11} C \left( \frac{M}{kg} \right). \quad (5)$$

Cuando se alcanza esta carga, se habla de un agujero negro de Reissner-Nordstrom *extremal*. Se presume que los agujeros negros astrofísicos deben tener una carga neta nula o muy pequeña, ya que un agujero con  $Q \neq 0$  rápidamente atraerá cargas opuestas que lo llevarán a la neutralidad. En este sentido, los agujeros negros de Reissner-Nordstrom revisten un interés más matemático que astrofísico.

## V. AGUJERO NEGRO DE KERR

Casi medio siglo después de los descubrimientos de Schwarzschild, Reissner y Nordstrom, el físico neozelandés Roy Kerr encontró una solución exacta para el espacio-tiempo de un agujero negro con momentum angular (rotación) [4,5]. El agujero negro de Kerr es el más realista, ya que todos los objetos del universo tienen algún grado de rotación. No obstante, cuando la rapidez angular es pequeña, el agujero de Schwarzschild puede ser una buena aproximación para los agujeros negros astrofísicos.

Al igual que el caso analizado en la sección anterior, el agujero negro de Kerr tiene dos horizontes esféricos concéntricos, uno interno y otro externo (ver Figs. 3 y 4). Nuevamente, un observador en el exterior solo puede ver lo que sucede fuera

del horizonte externo. Para un agujero de Kerr con momentum angular  $J$ , el radio del horizonte externo se escribe como [5]:

$$R_+ = \frac{GM}{c^2} + \sqrt{\frac{G^2M^2}{c^4} - \frac{J^2}{c^2M^2}} \quad (6)$$

El radio del horizonte interno es:

$$R_- = \frac{GM}{c^2} - \sqrt{\frac{G^2M^2}{c^4} - \frac{J^2}{c^2M^2}} \quad (7)$$

Vemos que  $R_+ \geq R_-$ . Estas dos ecuaciones pueden sintetizarse como:

$$R_\pm = \frac{R_S}{2} \pm \sqrt{\frac{R_S^2}{4} - \frac{J^2}{c^2M^2}}. \quad (8)$$

Se observa que para  $J = 0$ , el agujero de Kerr se convierte en estático, ya que  $R_- = 0$  y  $R_+ = R_S$ . La estructura de un agujero negro de Kerr es más compleja que las analizadas antes. En primer lugar, la singularidad central no es un punto sino un anillo localizado sobre el plano ecuatorial. En segundo lugar, además de sus dos horizontes concéntricos, tiene una región que se encuentra fuera del horizonte exterior llamada *ergósfera*, donde ningún objeto puede mantenerse estático (Fig. 3). De acuerdo con el efecto *Lense-Thirring*, el espacio-tiempo en las proximidades del agujero de Kerr es arrastrado por la rotación de éste, arrastrando consigo a todos los objetos situados en la ergósfera, impidiendo que permanezcan estáticos<sup>2</sup>. Por esta razón, al límite exterior de la ergósfera se le conoce como *límite estático*. Como la ergósfera está fuera del horizonte, un objeto que se desplace suficientemente rápido hacia el exterior puede escapar del agujero negro, siempre que se encuentre fuera del horizonte externo.

El radio del límite estático se calcula como [5]:

$$r = \frac{R_S}{2} + \sqrt{\frac{R_S^2}{4} - \frac{J^2}{M^2c^2}\cos^2\theta}, \quad (9)$$

donde  $\theta$  es el ángulo polar (Fig. 5). Esta ecuación muestra que en los polos (donde  $\theta = 0^\circ$  y  $\theta = 180^\circ$ )  $r = R_+$ , y en el ecuador (donde  $\theta = 90^\circ$ )  $r = R_S$ .

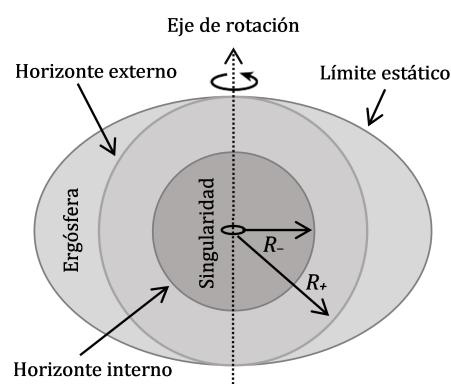


Figura 3. Agujero negro de Kerr visto paralelamente a su eje de giro. El ensanchamiento de la ergósfera en el ecuador se debe a la rotación.

<sup>2</sup>Un agujero de Kerr se encuentra en rotación perfectamente rígida; todos los puntos del horizonte tienen la misma rapidez angular.

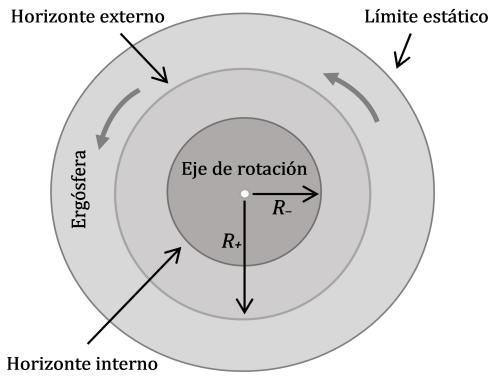


Figura 4. Agujero negro de Kerr visto desde uno de sus polos.

Como la rotación es una forma de energía cinética, los agujeros de Kerr pueden almacenar una gran cantidad de energía en la ergósfera, y como esta región se encuentra fuera del horizonte externo, puede ser extraída. Se han propuesto diversos mecanismos para efectuar dicha extracción. Uno de los más populares es el *proceso de Penrose*, propuesto por Penrose en 1967.

Cálculos detallados revelan que la energía máxima que puede extraerse de un agujero de Kerr es un 29 % de su masa inicial. Para tener una base de comparación, recordemos que la eficiencia de una reacción de fusión nuclear es  $\sim 1\%$ . Una vez que se ha extraído toda la energía rotacional, el agujero de Kerr deja de girar y se convierte en estático, como se demuestra al tomar  $J = 0$  en la ecuación (8). Cuando ello ocurre, clásicamente no es posible extraer más energía del agujero de Kerr.

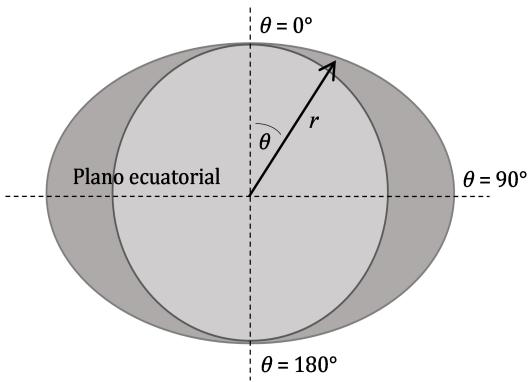


Figura 5. Radio del límite estático en función del ángulo polar  $0^\circ \leq \theta \leq 180^\circ$ .

Es evidente que  $J$  no puede aumentar indefinidamente, pues la rotación genera una fuerza centrífuga que se opone a la gravedad. Si la fuerza centrífuga superara a la gravedad, el agujero negro desaparecería y se formaría una singularidad desnuda. Para calcular el valor máximo de  $J$  anulamos la cantidad subradical en la ecuación (8):

$$J_{max} = \frac{1}{2}McR_S = \frac{GM^2}{c} \approx 2,2 \times 10^{-19} kg \cdot m^2 \cdot s^{-1} \left( \frac{M}{kg} \right)^2. \quad (10)$$

Cuando se alcanza este momentum angular, se habla de un agujero de Kerr extremal. En este estado, la rapidez de rotación

del horizonte es cercana a  $c$ . Los agujeros de Kerr permiten modelar los fenómenos más energéticos del universo, como los *núcleos activos de galaxias*, cuyas fantásticas emisiones de energía se explican mediante un modelo donde un agujero negro supermasivo que está próximo al estado extremal, actúa como un motor gravitacional cuyo combustible es un disco de acreción.

## VI. AGUJERO NEGRO DE KERR-NEWMAN

Dos años después de que Kerr encontrara la solución que lleva su nombre, el físico Ezra T. Newman y sus colaboradores descubrieron una solución exacta a la ecuación de Einstein que representa el espacio tiempo de un agujero negro cargado y rotante [4, 5]. Debido a la presencia de carga, esta solución tiene escaso interés astrofísico.

En analogía con las soluciones de Reissner-Nordstrom y de Kerr, el agujero negro de Kerr-Newman posee dos horizontes concéntricos cuyos radios son [5]:

$$R_\pm = \frac{GM}{c^2} \pm \sqrt{\frac{G^2M^2}{c^4} - \frac{J^2}{c^2M^2} - \frac{GQ^2}{4\pi\epsilon_0 c^4}}. \quad (11)$$

La condición para que  $Q$  y  $J$  combinados tengan el valor máximo permitido se obtiene anulando la cantidad subradical:

$$\frac{G^2M^2}{c^4} = \frac{J^2}{c^2M^2} + \frac{GQ^2}{4\pi\epsilon_0 c^4}. \quad (12)$$

Fuera de esto, el agujero de Kerr-Newman posee cualitativamente la misma estructura que el de Kerr.

## VII. LA GEOMETRÍA DEL ESPACIO-TIEMPO EN TORNO A UN AGUJERO NEGRO

Según la relatividad general, la gravedad no es una fuerza como supuso Newton, sino una manifestación de la curvatura del espacio-tiempo. Dicho espacio-tiempo tiene tres dimensiones espaciales y una temporal, de modo que es cuatridimensional (4D). Los objetos que se mueven libremente en este espacio-tiempo, se limitan a seguir las trayectorias dictadas por la geometría espaciotemporal. En este sentido, la masa le dice al espacio-tiempo como curvarse, y el espacio-tiempo le dice a la masa como moverse [7].

En las cercanías de un agujero negro, el espacio-tiempo se encuentra muy curvado. Un recurso utilizado frecuentemente para representar esta curvatura es el *diagrama de inmersión* [8]. Para estudiar el espacio-tiempo alrededor de un agujero negro mediante este tipo de diagrama, podemos centrar nuestra atención en la geometría de Schwarzschild, que es la más simple. Cualitativamente, el espacio-tiempo en torno a los otros tipos de agujero negro es similar a la de Schwarzschild.

Para comenzar, debemos tener presente que la geometría de Schwarzschild es estática y estacionaria (no depende del tiempo), lo cual significa que no se pierde ninguna información si consideramos el tiempo constante; además, como dicha geometría es esféricamente simétrica, tampoco se pierde información si solo consideramos planos paralelos al

plano ecuatorial. Lo anterior equivale formalmente a eliminar dos dimensiones, una temporal y otra espacial. El beneficio de esto es que la geometría de Schwarzschild queda reducida a una superficie curva 2D que podemos visualizar, ya que queda inmersa (de aquí proviene el nombre "diagrama de inmersión") en un espacio 3D. Esta superficie 2D se denomina *paraboloide de Flamm*, y se genera por la rotación continua de una parábola en torno a un eje perpendicular al plano ecuatorial (eje  $z$ ). La ecuación de esta parábola es [8]:

$$z = \pm 2 \sqrt{R_S(r - R_S)} = \pm 2 \sqrt{R_S(\sqrt{x^2 + y^2} - R_S)}. \quad (13)$$

La Fig. 6 muestra la parábola en color negro, donde se muestra la misma parábola, en rojo, rotada 180° respecto del eje  $z$ . La Fig. 7 muestra el paraboloide de Flamm obtenido al efectuar una rotación de la parábola en torno al eje  $z$ , donde solo se muestra la región  $z^+$ . El plano ecuatorial corresponde al plano  $x - y$ . Vemos que la ecuación (13) también admite una solución negativa, correspondiente a la región  $z^-$ . Esta región se relaciona con los agujeros de gusano, un tema fascinante y controvertido que no analizaremos en este trabajo. El lector interesado puede encontrar una excelente discusión no técnica en [4]. Un análisis más técnico se encuentra en [9].

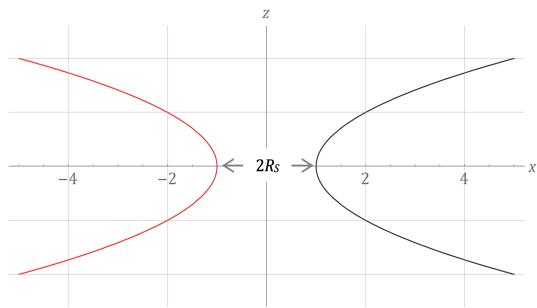


Figura 6. La rotación de la parábola negra en torno al eje  $z$  genera el espacio-tiempo de Schwarzschild 2D.

Para obtener las gráficas hemos tomado  $R_S = 1$ , de modo que los ejes  $x$  e  $y$  están expresados en unidades del radio de Schwarzschild. Se observa que la parábola corta el eje  $x$  en  $R_S$ . Notemos que el diagrama no muestra el interior del agujero negro ni la singularidad. La razón es que para  $r < R_S$ , el lado derecho de la ecuación (13) se vuelve complejo.

La forma del paraboloide recuerda la analogía de la tela elástica (rubber sheet analogy), utilizada frecuentemente en discusiones elementales para representar la curvatura del espacio-tiempo. Sin embargo, es importante tener presente que la similitud entre ambas representaciones es superficial. La principal diferencia es que solo el paraboloide de Flamm es matemáticamente riguroso. Además, recordemos que la construcción del paraboloide supone que el tiempo es constante, lo que significa que la Fig. 7 es una suerte de fotografía del espacio-tiempo; en consecuencia, a diferencia de lo que ocurre con la analogía de la tela elástica, no pueden existir objetos moviéndose sobre la superficie del paraboloide.

Las Figs. 6 y 7 muestran que las distancias radiales sobre el paraboloide son mayores que las correspondientes distancias sobre el plano  $x - y$ . Es decir, las distancias radiales en el

espacio-tiempo curvado por un agujero negro son mayores que las correspondientes distancias en un espacio-tiempo plano. Por ejemplo, si en la Fig. 6 consideramos los puntos  $x = 2$  y  $x = 4$ , vemos que la distancia entre estos puntos medida sobre el eje  $x$  es menor que la correspondiente distancia medida sobre la parábola (curva negra). Todo esto revela que en las proximidades de un agujero negro no podemos atribuir a las distancias radiales un significado físico directo; dichas distancias se miden sobre un espacio fuertemente curvado (representado por la superficie del paraboloide cerca de  $r = R_S$ ) cuya geometría es no euclíadiana, mientras que las distancias de nuestra experiencia cotidiana pueden medirse con un alto grado de aproximación mediante la geometría plana de Euclides, pues la gravedad que experimentamos en nuestro entorno es muy débil, y los efectos de la relatividad general y de la curvatura espaciotemporal pueden despreciarse.

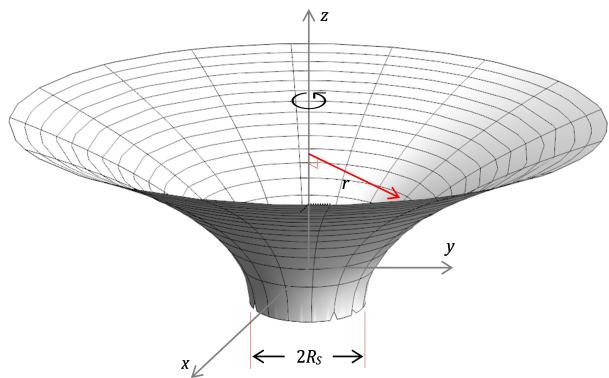


Figura 7. El paraboloide de Flamm representa el espacio-tiempo de Schwarzschild 2D.

Otro aspecto importante de la geometría de Schwarzschild, que se aprecia en la Fig. 6, y que está directamente relacionado con lo discutido en el párrafo anterior, es que en la medida que nos alejamos del eje  $z$ , donde se localiza el agujero negro, la superficie de la parábola es cada vez más plana (menos curva), lo que implica que la superficie del paraboloide también es cada vez más plana. Técnicamente se dice que el espacio-tiempo es *asintóticamente plano*. Podemos verificar esta propiedad derivando la ecuación (13):

$$\frac{dz}{dr} = \frac{R_S}{\sqrt{R_S(r - R_S)}} = \frac{1}{\sqrt{r/R_S - 1}}. \quad (14)$$

Esta expresión nos permite calcular la pendiente sobre la dirección radial en cualquier punto de la superficie del paraboloide. Vemos que cuando  $r \rightarrow \infty$ ,  $dz/dr \rightarrow 0$ . Es decir, para  $r \gg R_S$  la pendiente es nula y la superficie del paraboloide es plana. Esto significa que lejos del agujero negro los efectos de la relatividad general son cada vez más pequeños, y la ley de gravitación de Newton se convierte en una buena aproximación para describir la gravedad.

Finalmente es importante considerar que solo la superficie 2D del paraboloide de Flamm tiene significado como parte de la geometría de Schwarzschild. Los puntos fuera de la superficie carecen de significado físico, ya que en un diagrama de inmersión el universo queda reducido a la superficie 2D

del parabolóide, lo que significa que el espacio 3D exterior no forma parte del universo.

### VIII. CONCLUSIONES

Existen muchos temas sobre la física de los agujeros negros que por motivos de espacio no hemos abordado en este trabajo, como la espaguetización, los agujeros de gusano, o la termodinámica de los agujeros negros, entre otros. Quienes deseen profundizar en estos y otros temas afines, pueden recurrir a la extensa literatura, tanto divulgativa [4,6,10–12] como técnica [5,13–15]. El lector también puede revisar otros artículos del autor sobre este tema [2,3,16,17]. En cualquier caso, tengo la esperanza de que los tópicos escogidos sean una estimulante introducción a la física de los agujeros negros, y motiven al lector a continuar profundizando en este fascinante tema.

### AGRADECIMIENTOS

Quisiera agradecer a Daniela Balieiro por sus útiles comentarios durante la redacción de este artículo.

### REFERENCIAS

- [1] Y. Bonder, B. A. Juárez-Aubry, Rev. Cubana Fis. **37**, 142 (2020).
- [2] J. Pinochet, Phys. Educ. **54**, 035014 (2019).
- [3] J. Pinochet, Rev. Mex. Fís. E, **65**, 182 (2019).
- [4] J.P. Luminet, *Agujeros Negros* (Alianza, Madrid, 1991), Capítulos 9, 10, 11.
- [5] V.P. Frolov, A. Zelnikov, *Introduction to Black Hole Physics* (Oxford University Press, Oxford, 2011), Chapters 6, 8.
- [6] M. Bartusiak, *Agujeros Negros* (Ariel, Barcelona, 2016), Capítulo 3.
- [7] J.A. Wheeler, *A Journey into Gravity and Spacetime* (W. H. Freeman and Company, New York, 1990).
- [8] A.M. Steane, *Relativity Made Relatively Easy* (Oxford University Press, Oxford, 2012), Chapter 11.
- [9] M.S. Morris, K.S. Thorne, Am. J. Phys. **56**, 395 (1988) .
- [10] S. Hacyan, *Los Hoyos Negros y la Curvatura del Espacio-Tiempo*, 3rd ed. (Fondo de Cultural Económica, México, D. F., 2008).
- [11] K.S. Thorne, *Agujeros Negros y Tiempo Curvo: El Escandaloso Legado de Einstein* (Crítica, Barcelona, 2000).
- [12] L. Susskind, *La Guerra de los Agujeros Negros: Una Controversia Científica sobre las Leyes Últimas de la Naturaleza* (Crítica, Madrid, 2009).
- [13] R. Ruffini, J.A. Wheeler, Phys. Today **24**, 30 (1971) .
- [14] B.E. Baaquie, F.H. Willeboordse, *Exploring the Invisible Universe: from Black Holes to Superstrings* (World Scientific Publishing, Singapore, 2015).
- [15] T.L. Chow, *Gravity, Black Holes, and the Very Early Universe* (Springer, New York, 2008).
- [16] J. Pinochet, Phys. Educ. **53**, 065004 (2018).
- [17] J. Pinochet, Phys. Educ. **54**, 55003 (2019) .

---

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.



# LA IMPRONTA DEL PROFESOR JOAQUÍN GONZÁLEZ ÁLVAREZ EN LA ENSEÑANZA DE LA FÍSICA EN HOLGUÍN

THE IMPRINT OF PROFESSOR JOAQUÍN GONZÁLEZ ÁLVAREZ IN THE TEACHING OF PHYSICS IN HOLGUÍN

S. L. GONZÁLEZ-BELLO<sup>a†</sup>, J. ALÍ-SÁNCHEZ<sup>b</sup>

a) Departamento Física, Universidad de Holguín, Cuba; sgonzalez@aho.edu.cu<sup>†</sup>

b) Departamento Ciencias de la Información, Universidad de Holguín, Cuba

† autor para la correspondencia

Recibido 10/2/2021; Aceptado 10/3/2021

PACS: Historia de la ciencia (history of science), 01.65.+g; Enseñanza de la física (physics education), 01.40.-d; métodos de enseñanza de la física (physics teaching methods), 01.40.gb

El 21 de junio de 2020 dejó de existir el Profesor Joaquín González Álvarez en Miami, Estados Unidos. Con su partida física deja una huella imperecedera en familiares, amigos, antiguos estudiantes de bachillerato o de la carrera profesional de Física y en la sociedad holguinera. Sobre su vida y obra, se resaltan su quehacer pedagógico, científico, literario, periodístico, cultural y su fecunda existencia [1, 2]. Pero en esas publicaciones no se profundiza en su aporte a la enseñanza de la Física. Sin dejar de reconocer su trayectoria y su participación en la vida social holguinera, el propósito del artículo es destacar cualidades que revelan su contribución a la enseñanza de la Física.

## SU TRAYECTORIA COMO ESTUDIANTE

Nació el 11 de septiembre de 1924 en Tunas. Hijo de Ana Álvarez Velázquez y de Joaquín González Escalona. Su padre, graduado en la Escuela Normal Superior de la Universidad de Zaragoza, fue ejemplo de dedicación a la Física, en la que fue iniciador de su enseñanza en Holguín, además de cultivador de las Ciencias Naturales y Exactas [2].

En 1931 comenzó la Escuela Primaria en el Colegio Holguín. En 1936 aprobó el examen de ingreso en el Instituto de Segunda Enseñanza Enrique José Varona de Holguín y se graduó en 1940 de Bachiller en Ciencias y Letras.

En 1941 comenzó la carrera de Doctor en Ciencias y Letras, en la Universidad de La Habana, y por necesidades económicas, en 1943, interrumpió sus estudios. En 1945 inició la carrera Optometría en la Facultad de Medicina y se graduó en 1949.

En los años 1950 y 1951, realizó cursos de verano de Física Teórica en la Universidad de La Habana.

## SUS INICIOS COMO PROFESOR DE FÍSICA

De manera simultánea con sus estudios universitarios, en 1944 inició su labor como profesor de Física en el Colegio de Las Dominicas Francesas, hasta 1945. También fue profesor de

Física en el Colegio de Belén en La Habana [1]. En 1951, comenzó a ejercer como profesor de Física en el Colegio Los Amigos, de Holguín, y de forma privada se desempeñó como optometrista.

## SU LABOR EN EL INSTITUTO DE SEGUNDA ENSEÑANZA ENRIQUE JOSÉ VARONA

En 1953 es nombrado profesor de la Cátedra de Física y Química en el Instituto de Segunda Enseñanza Enrique José Varona, y en esa labor se ganó el respeto de estudiantes y trabajadores, por sus cualidades como educador y como ciudadano. En 1957 se trasladó a la ciudad de Tunas, donde fungió como profesor de Física en el Colegio Victoria de Las Tunas, hasta 1958. También entre los años 1959 y 1960 enseñó Física en el Colegio Divina Pastora, en la ciudad de Bayamo.

## SU LABOR EN EL INSTITUTO SUPERIOR PEDAGÓGICO DE HOLGUÍN

En 1969 comenzó a trabajar como optometrista en el Hospital Provincial de Holguín V. I. Lenin, y simultáneamente con esa función, se vinculó como profesor adjunto en el Instituto Superior Pedagógico de Holguín desde 1972, contribuyendo a la formación de profesores de Física. Matriculó la carrera profesional de Física, de la que se graduó en 1975. En 1977 pasó a trabajar a tiempo completo en el Instituto Superior Pedagógico de Holguín, hasta su jubilación en 1990. En 1980 obtuvo la categoría docente de Asistente y en 1985, la de Profesor Auxiliar.

## CUALIDADES PERSONALES COMO PROFESOR DE FÍSICA

Se destacaba por la científicidad de la enseñanza, y por su maestría pedagógica, al exponer con rigor y elegancia el contenido de sus clases. Como formador de profesores

fue ejemplo a imitar enseñando Óptica, pero dominaba y explicaba cualquiera de las asignaturas de la disciplina Física General, y también las asignaturas de la Física Teórica. Se ocupaba en la formación de profesores jóvenes.

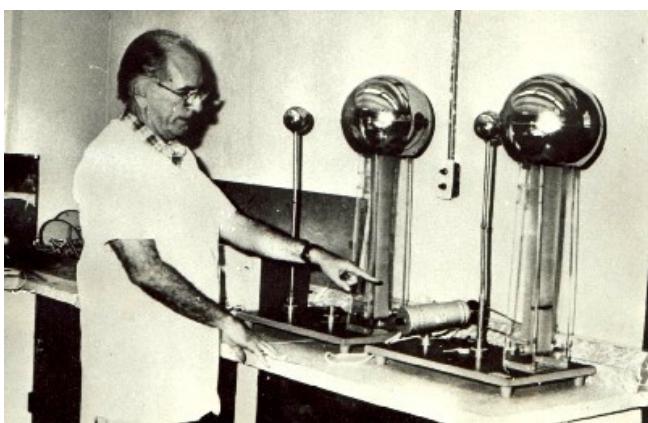


Figura 1. Foto de Joaquín González Álvarez (cortesía de Jandy Alí Sánchez)

Se caracterizó por su cultura enciclopédica al explicar los tópicos, y delineando con estética en la pizarra las deducciones de las ecuaciones claves. Ampliaba los temas con apuntes históricos, y ofrecía con elocuencia pinceladas sobre la vida y obra de científicos relevantes. En las clases describía con precisión experimentos fundamentales de la Física. Establecía generalizaciones teóricas con rigor matemático, y ejemplificaba las aplicaciones prácticas de los temas tratados.

Dedicaba muchas horas a la preparación de las clases en hojas a lápiz, colocando en los márgenes acotaciones para la profundización. Resolvía hábilmente los ejercicios y problemas contenidos en los libros de texto recomendados a los estudiantes.

Entre sus cualidades personales se destacan la puntualidad, disciplina, laboriosidad, precisión, capacidad de trabajo y solidaridad. Despreciaba los formalismos y trámites burocráticos que agobian a los profesores.

#### PUBLICACIONES CIENTÍFICAS Y DIVULGACIÓN DE SU OBRA LITERARIA Y PERIODÍSTICA

Joaquín González Álvarez, además de ser un prestigioso profesor de Física, tuvo una participación activa en el quehacer científico, literario, periodístico y cultural de Holguín. Su quehacer se divulgó en Nicaragua, México, España y Estados Unidos.

Fue autor de libros de texto para la Educación Superior: Óptica, en dos partes, publicado en 1983, por la Editorial Pueblo y Educación, para la formación de profesores de Física [3], y Óptica Oftalmológica por la Editorial Ciencias Médicas en 1989 [4], para la docencia médica.

Es considerado un precursor en Cuba en vincular la Ciencia con la Literatura. En 1991 Ediciones Holguín, publicó su libro Lo científico en la literatura [5], una selección de artículos sobre la ciencia y su relación con el arte y la literatura. Uno de

los artículos motivó al poeta nicaragüense Ernesto Cardenal, a enviarle un ejemplar de su libro Cántico cósmico dedicado y autografiado.

En el 2001, la misma editora publicó Ciencia, Arte y Literatura [6], consistente en una recopilación de artículos expuestos en distintos medios, en los que se aborda la interrelación entre Ciencia, Arte y Literatura.

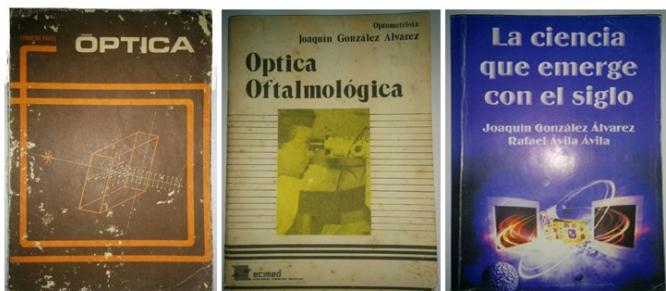


Figura 2. Facsímiles de libros publicados por Joaquín González Álvarez (los autores).

En el 2005 la editorial Academia publicó La ciencia que emerge con el siglo [7], que pone la ciencia al alcance de todos, al develar con lenguaje sencillo, aspectos novedosos de la Física, la Astronomía, la Matemática, la Medicina y la Biología.

Desde 1979 perteneció al Consejo de Redacción del Boletín Informativo del Instituto Superior Pedagógico de Holguín, y en 1995 se integró al Consejo Editorial de la Revista Electrónica "Ciencias Holguín".

Se destacan además sus publicaciones en las revistas: Ciencias Holguín, Casa de las Américas, Ámbito, Serranía, y Diéresis [1], así como publicaciones en boletines, documentos, y ponencias en eventos científicos.

En 1969 inició su colaboración en el periódico Ahora, representativo de Holguín, en el que tuvo una sección fija. En [1] se refiere la publicación en él, de más de 150 artículos sobre temas científicos de actualidad.

#### RECONOCIMIENTOS RECIBIDOS

Desde el triunfo de la Revolución, colaboró con tareas importantes. En 1960 fue coordinador provincial de Optometría en la Campaña de Alfabetización, actividad que constituyó en Cuba uno de los logros más importantes después del triunfo revolucionario.

En el 2000 participó en el equipo de la misión ORBIS (organización humanitaria sin fines de lucro que tuvo su génesis en el año 1982, en Estados Unidos, con el fin de eliminar la ceguera haciendo énfasis en la enseñanza del cuidado de la visión), en el Aeropuerto de Holguín, por los aportes teórico-prácticos brindados en el hospital V. I. Lenin.

Como personalidad destacada en su quehacer científico, formó parte del directorio "Quién es quién en las ciencias en Cuba", que constituye una fuente de información referencial, y una herramienta para la toma de decisiones en políticas de Ciencia, Tecnología e Innovación [1]. Fue miembro fundador de la Sociedad Cubana de Física en Holguín.

En su trayectoria obtuvo premios, condecoraciones y reconocimientos. Se destacan: el Premio Nacional en Jornadas Pedagógicas en 1976, el Premio de la Ciudad en prensa plana en 1994, y en 1997 el Premio provincial del CITMA por su trabajo "Método de adaptación de lentes de contacto".

Recibió las Distinciones por la Educación Cubana y Octubre Rojo y las Medallas Rafael María de Mendié, por la Alfabetización y 40 Aniversario de las FAR. Fue reconocido con las Placas Conmemorativas por el XX y el XXX Aniversario de la fundación del Instituto Superior Pedagógico de Holguín.

Sirva este trabajo como un modesto homenaje del Grupo de la Sociedad Cubana de Física en Holguín a Joaquín González Álvarez, que constituyó un hito en la enseñanza de la Física, donde dejó huellas en conferencias, cursos, talleres y eventos, y contribuyó a la divulgación de los adelantos científicos, así como a enriquecer la cultura e identidad holguineras.

## REFERENCIAS

- [1] J. Alí Sánchez *et al.*, Ciencias Holguín. XVI, 1 (2010).
- [2] J. Alí Sánchez, M. Lozano Folgueira, Ciencias Holguín. 2, 1 (1996).
- [3] J. González Álvarez *et al.*, Óptica. 2 t, (Pueblo y Educación, La Habana, 1983).
- [4] J. González Álvarez, Óptica Oftalmológica, (Editorial Ciencias Médicas, La Habana, 1989).
- [5] J. González Álvarez. Lo científico en la literatura, (Ediciones Holguín, Holguín, 1991).
- [6] J. González Álvarez. Ciencia, Arte y Literatura, (Ediciones Holguín, Holguín, 2001).
- [7] J. González Álvarez, R. Ávila Ávila. La ciencia que emerge con el siglo, (Academia, La Habana, 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.



## MARÍA SÁNCHEZ-COLINA, ELECTA PRESIDENTE DE LA FEIASOFI



Dra. María Sánchez-Colina, recientemente electa presidenta de la FEIASOFI.

La doctora María Sánchez-Colina, Presidenta de la Sociedad Cubana de Física, ha sido electa presidenta de la Federación Iberoamericana de Sociedades de Física (FEIASOFI). Se trata de una importante responsabilidad dentro nuestra región geográfica, muy merecidamente asumida por Maruchy,

cuyo historial al servicio de la Física en Cuba se extiende por más de tres décadas, y cuya labor científica y docente son harto conocidas. La elección tuvo lugar el pasado 8 de febrero de 2021, como parte de la IX Asamblea General de la organización.

La FEIASOFI es una organización que aúna las físicas y físicos de Latinoamérica para promover el avance de esta disciplina en la región. En la reunión virtual arriba mencionada, participaron representantes de las asociaciones de Física de Argentina, Brasil, Costa Rica, Cuba, Chile, España, Guatemala, Honduras, Nicaragua, Portugal, República Dominicana, Uruguay y Venezuela.

Además de ser elegida la Dra. María Sánchez Colina de Cuba como Presidente, también fueron seleccionados el Dr. Nabil Kawas de Honduras como Vicepresidente, el Dr. José Adolfo de Azcárraga de España como Tesorero, como Vocal la Dra. Cecilia Stari de Uruguay y como Presidente saliente el Dr. Arturo Martí de Uruguay.

Es un orgullo para nuestra disciplina que una colega de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana haya sido elegida para el puesto. Adicionalmente, resulta una muestra más del creciente impacto de la mujer en una disciplina supuestamente dominada por los hombres... aunque sinceramente, difícilmente podamos apreciar discriminación alguna si examinamos la historia de vida de la propia Maruchy.

E. Altshuler

## CELEBRANDO EL DÍA DE LA CIENCIA: ICIMAF VS. COVID-19

El 20 de enero de 2021, el Instituto de Cibernética, Matemática y Física (ICIMAF) celebró el día de la ciencia cubana, de forma virtual. Comenzando con una presentación por parte de los organizadores a las 11 AM, continuó con la conferencia “El legado de Einstein”, por el Dr. Hugo Pérez. Luego, se llevó a cabo una sesión virtual de presentación de trabajos realizados por diversos grupos del ICIMAF que contribuyen a paliar la crisis asociada a

la COVID-19. La sesión comenzó con una introducción por parte de los organizadores, y continuó las conferencias “La página web covid19cubadata”, por Frank Sadán; “Modelación mecanística del COVID-19”, por Alejandro Cabo y “Procesamiento de imágenes médicas de la Covid-19”, por Roberto Rodríguez.

Versionado de la página web del ICIMAF  
(Basado en [www.icimaf.cu/noticia/?id=33](http://www.icimaf.cu/noticia/?id=33))

## 28 AÑOS DEL CENTRO DE BIOFÍSICA MÉDICA

Este 10 de febrero de 2021, el Centro de Biofísica Médica adscrito a la Universidad de Oriente cumplió 28 años de creado. A lo largo de su historia, el centro ha creado equipos y realizado investigaciones donde se combinan disciplinas como la Física, las ingenierías, la informática y la medicina. Un extraordinario logro histórico es el haber construido 3 tomógrafos de resonancia magnética. También el diseño y

construcción del equipo Angiodin PD 3000, para estudios vasculares, de amplio uso en el país y también en Venezuela. Igualmente, está el electromiógrafo superficial, un laboratorio para análisis de la marcha, y un software para la transmisión de imágenes médicas.

(Basado en [www.uo.edu.cu/2021/02/10/centro-de-biofisica-medica-28-anos-aportando-ciencia-al-servicio-de-cuba/](http://www.uo.edu.cu/2021/02/10/centro-de-biofisica-medica-28-anos-aportando-ciencia-al-servicio-de-cuba/))

## DE LA MOTO ELÉCTRICA AL ROBOT CUBANO PALMICHE UGV

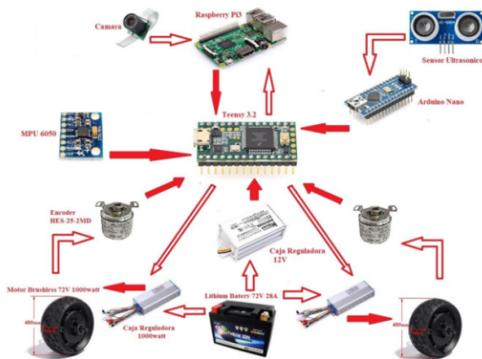
La robótica resulta una disciplina extremadamente útil y competitiva, que suele requerir de piezas y partes que, en muchos casos, hoy constituyen un “standard” internacional. Cuando no se dispone de tales componentes, hay que echar mano al ingenio. Tal es el caso del robot cubano “Palmiche UGV”, que ha ganado el Primer Premio en la primera edición del “Robotic People Fest Virtual” (Convocado desde Bogotá, Colombia) dentro de la categoría “Pro Innovation Challenge”.

Creado por un grupo de ingenieros y físicos de la CUJAE y el ICIMAF, se trata de un robot no tripulado, que fue puesto a prueba en el Hospital Psiquiátrico de la Habana durante 6 semanas. Palmiche UGV fue concebido en su totalidad utilizando software y hardware abiertos, además de componentes reciclados de otros vehículos eléctricos de uso común en el país –especialmente ruedas con motores eléctricos, baterías de litio y cajas controladoras de 1000 watts.

El robot consta de 3 plataformas de hardware, todas ellas estándares de costo relativamente bajo: Una placa Teensy 3.2 destinada a los mecanismo de orientación y control, un Arduino Nano destinado a la detección de objetos y una Raspberry Pi 3b para el control visual y remoto del robot. Naturalmente, su navegación depende de varios tipos de sensores basados en diversos principios físicos. Una de sus capacidades más interesantes es la de detección de calles y de otros vehículos a través de algoritmos de visión artificial programados en el lenguaje Python, lo que le permite la conducción autónoma, al menos dentro de ciertos límites.

Palmiche UGV puede operar en tres modalidades: Seguidor Autónomo de Ruta, Telecontrol y Visión Artificial. La prueba piloto realizada en el Hospital Psiquiátrico de La Habana, demostró que Palmiche UGV es, potencialmente,

una alternativa económica viable a los autos eléctricos de fabricación china que se usan en el centro, donde ayudó a transportar cargas de hasta 300 kilogramos, a una velocidad de hasta 1.2 m/s.



Anatomía de Palmiche UGV. Panel superior: vista exterior del robot. Panel inferior: Esquema eléctrico (nótese, en la parte inferior del esquema, varios componentes típicos de las motos eléctricas).

E. Altshuler

## 1ER TALLER SOBRE LA ENSEÑANZA DE LAS CIENCIAS BÁSICAS

Convocado por el Instituto de Ciencias Básicas (ICB) de la Universidad Tecnológica de La Habana “José Antonio Echeverría” CUJAE, se desarrolló entre los días 18 al 20 de mayo del 2021 el primer TALLER SOBRE LA ENSEÑANZA

DE LAS CIENCIAS BÁSICAS (Ciencias Básicas 2021) en modalidades online y a distancia. El taller tuvo como divisa “Las Ciencias Básicas en tiempos de COVID”.



Delegados durante la presentación de una conferencia online cumpliendo las medidas de distanciamiento y protección.

El objetivo general del taller fue propiciar el intercambio y el debate científico acerca de la enseñanza-aprendizaje de las ciencias básicas ante los nuevos retos que impone la tecnología en el siglo XXI y, en particular, en tiempos de COVID. Con énfasis en la enseñanza de la Física y de la Matemática.

En el evento participaron un total de 167 delegados de estos 155 cubanos y 12 extranjeros representando a Perú, Ecuador, México, Brasil y España. Los debates se centraron alrededor de temáticas tales como:

- El proceso docente educativo en el contexto de las ciencias básicas.
- La creatividad, la interdisciplinariedad y la innovación en la enseñanza-aprendizaje de las disciplinas que conforman las ciencias básicas.
- La evaluación de las disciplinas de ciencias básicas en la modalidad a distancia.

- Las tecnologías de la información y la comunicación en la enseñanza de las ciencias básicas. Perspectivas y retos.

Se dictaron 16 Conferencias, 4 por conferencistas nacionales y 12 por conferencistas extranjeros, de los países antes mencionados en la modalidad de videoconferencia empleando la plataforma Jitsi.

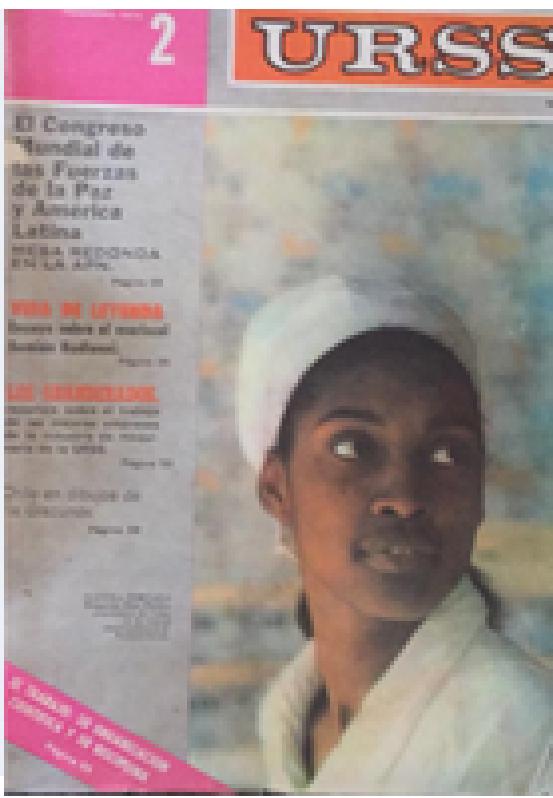
Durante los tres días en que sesionó el evento se debatieron de manera asincrónica 57 ponencias en total de las cuales 11 estuvieron relacionadas con temas de enseñanza de la Física y 14 relacionadas con la enseñanza de la Matemática así como otras relacionadas con la enseñanza de las ciencias sociales la gráfica para ingeniería y la enseñanza del idioma lográndose un rico intercambio académico acerca de los temas tratados.

J. Llovera y Y. O'Farill,  
Universidad Tecnológica de la Habana,  
José A. Echevarría, CUJAE.

---

## DRA. MARGARITA PIEDRA DÍAZ

(5 de marzo de 1948 - 3 de septiembre de 2020)



Margarita Piedra (5 de marzo de 1948 – 3 de septiembre de 2020).

El pasado año conocimos el lamentable fallecimiento de la Dra. Margarita Piedra Díaz, primera mujer Ingeniera Nuclear formada en Cuba y la URSS, y una de las profesoras de más larga trayectoria en el Instituto Superior de Tecnología y Ciencias Aplicadas (InSTEC), del cual fue fundadora hace casi 40 años.

Cursó estudios de ingeniería mecánica en la CUJAE, y paralelamente a su carrera, formó parte del primer grupo de universitarios que incursionaron en algunas asignaturas de carácter nuclear, graduándose en 1971. Luego de su graduación viajó a Moscú, antigua Unión Soviética, junto a otros estudiantes de posgrado, para ampliar sus conocimientos en el Instituto Energético de esa ciudad, en la cátedra de Centrales Electro-Nucleares. Eran siete hombres y una mujer, donde una joven y emprendedora Margarita, gracias a su talento y belleza, figuró en la portada de la revista "URSS" como ejemplo de la mujer científica cubana.

Después de arduos estudios, regresa a Cuba en 1973 y comienza a trabajar en el Ministerio de la Industria Básica. Ante la necesidad del país, se crea en la CUJAE la facultad donde se estudiaría la carrera de Ingeniería en Energética Nuclear, de la cual formó parte, integrándose como profesora desde 1977 hasta 1980.

Con la creación en 1981 de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Nucleares en Cuba, (actual InSTEC), pasa a su claustro de profesores en sus dos departamentos: Ingeniería Nuclear y Física Nuclear. Siendo Doctora en Ciencias Técnicas, post-graduada en Rusia, fue una de las primeras profesoras titulares del Departamento de Ingeniería Nuclear y llegó a ser jefa de dicho departamento y profesora consultante. Ahí se destacó en la tutoría de trabajos de diploma, tesis de maestría y doctorados. Inició el programa de estudios de la maestría en Ingeniería en Instalaciones Energéticas y Nucleares, que bajo su coordinación fue acreditada con la categoría de excelencia.

Vale la pena recordar su empeño para crear en el InSTEC un Laboratorio de Mecánica de Fluidos, que pese a las carencias, siempre contó con el apoyo entusiasta de estudiantes, profesores y otros colegas. Fue ampliamente valorada entre los ingenieros por su capacidad y su competencia profesional, que la hacían idónea para dirigir sus investigaciones y permanecer siempre activa como profesora y dirigente científica.

A pesar de haber sido una mujer dedicada a su carrera, el testimonio familiar de su esposo e hijas ilustra su incalculable entrega y amor a la familia que formó, así como el legado que dejó a sus seres queridos. Fue una madre presente e involucrada en la vida de sus hijas, donde siempre buscó el tiempo para dedicarlo a su formación escolar y crianza. Tuvo una predilección por la música, sobre todo el piano, la cual trasladó a su hija menor, Yaimara, a la que encaminó en sus aptitudes musicales. Hoy es la profesional que es gracias a su madre. También sus nietos se han insertado en el camino de la música. Fue Margarita una persona muy especial, por su carácter, y por ser buena amiga y compañera.

Por su destacada trayectoria como profesional, recibió numerosas distinciones y premios, como el Sello del InSTEC en el 2001; el reconocimiento por parte de la American Biographical Institute como Mujer Científica del Año, y el Premio del Rector del InSTEC, ambos en el 2006; la Distinción Especial del Ministro de Educación Superior por su destacada labor educativa, docente y metodológica y la medalla José Tey, ambas en el 2013. Fue Vanguardia Nacional varias veces y, al momento de su muerte, ostentaba la condición especial de Profesora Consultante desde el año 2012.

La autora agradece la colaboración de varios profesores del Departamento de Ingeniería Nuclear del InSTEC, así como de familiares de Margarita, para la confección de este obituario.

María de los Ángeles Bedoya,  
Especialista de comunicación,  
InSTEC

## JUAN LÓPEZ GONDAR

(19 de agosto de 1947 - 3 de febrero de 2021)



Juan López Gondar (29 de agosto de 1947 - 17 de febrero de 2021).

Juan López Gondar nació en La Habana, Cuba, el 29 de agosto de 1947 y murió el pasado 17 de febrero de 2021 en Río de Janeiro, Brasil.

Estudió en el Instituto Pedagógico Enrique José Varona de la Habana graduándose en 1969 de la especialidad de Profesor de Bachillerato en Física y Matemáticas. Ejerció esta profesión durante varios años.

Simultáneamente a sus labores docentes en la Enseñanza Media, estudió la Licenciatura en Física en los Cursos para Trabajadores, donde destacó por sus resultados impecables; terminó en 1978. Por tal rendimiento muy por encima de lo estándar, el Depto. de Física Teórica de la Universidad de La Habana (UH) lo incorporó a su claustro alrededor de 1979. Años después la Facultad de Física seleccionó a los diez mejores graduados con mejores promedios docentes de la carrera desde que ésta había sido fundada, y entre ellos estaba Juan López Gondar. En el Depto. de Física Teórica fue promovido a Profesor Asistente en 1982 y a Profesor Auxiliar en 1988, hasta 1991, fecha en la que movió su residencia a Brasil. Mediante concurso obtuvo el primer lugar para profesor de Física del Instituto de Física de la Universidad Federal de Rio de Janeiro (UFRJ). Posteriormente en 1995 ingresó en el Departamento de Matemática Aplicada, en el Instituto de Matemática (IM) de la UFRJ ocupando la plaza de Profesor Adjunto hasta su deceso. Fue Jefe de Departamento del IM, UFRJ.

Defendió su tesis de doctorado en 1985 con título "Estructura Electrónica de Pozos Cuánticos y Superredes", bajo la dirección de los Dres. Melquiades de Dios Leyva y Rolando Pérez Álvarez. Esta tesis tuvo un doble mérito. Por un lado era de las primeras en realizarse enteramente en el Dpto. de Física Teórica de la UH (la primera había sido

la de Rolando Pérez Álvarez) y por otra, también era de los primeros trabajos que se hacían en Cuba sobre la Física de los Sistemas Nanoscópicos.

Sus áreas de actuación fueron los estudios de estructuras electrónicas nano-sistemas semiconductores y la propagación de dolencias contagiosas. En la UFRJ mantuvo colaboración estrecha con el Dr. Rolci Cipolati publicando dos libros:

1. Iniciación a la Física Matemática. Coleção Matemática e Aplicações, IMPA, ISBN: 978-85-244-0287-6, 2011.
2. Iniciación al Modelaje Matemático, Textos de Matemática, Editora IM-UFRJ, 2006.

En el momento de su fallecimiento tenía más de 60 publicaciones científicas y varias presentaciones en congresos.

En 1990 recibió la "Distinción por la Educación Cubana" otorgada por el Ministerio de Educación Superior de la República de Cuba. Durante su larga trayectoria docente dirigió una veintena de tesis de licenciatura, maestría y doctorado, e impartió una treintena de asignaturas diferentes, tanto en la Enseñanza Media, donde debutó como profesor, como en el pregrado y posgrado universitario. Pero más que cantidad de docencia, que es mucha y variada, Juan López Gondar dejó una estela admirable de prestigio como profesor, brillante a la hora de exponer cualquier tema, y por estar profundamente comprometido con la noble causa de enseñar.

En los últimos años de su vida, problemas de salud impidieron a Juan López Gondar proseguir con sus actividades académicas de forma regular. No obstante, siempre mostró preocupación de impartir la docencia de su departamento. En el seno del colectivo del IM se le recuerda por su espíritu alegre y cordial, su gran interés por el conocimiento y su ejemplo de responsabilidad profesional.

Rolando Pérez-Álvarez  
Departamento de Física,  
Universidad Autónoma del Estado de Morelos, México

Carlos Trallero-Giner  
Facultad de Física,  
Universidad de La Habana



