

MODULO PARA EL PROCESAMIENTO DE LA DATA EXPERIMENTAL DIELECTRICA

Manuel Hernández Vélez, Floirán Fernández Gutiérrez, Antonio Berazaín I., Eliecer González, I.S.P.
"Enrique José Varona"

RESUMEN

Con vistas al procesamiento y presentación de los datos de la espectrometría dieléctrica se ha elaborado un paquete de programas de computación, conformado en un solo módulo, que permite entre otras posibilidades:

- Trabajar con la data de impedancia, admitancia, conductancia, permitividad, susceptibilidad, corriente, etc.
- Graficar espectros.
- Calcular los parámetros característicos.
- Normalizar espectros.
- Calcular la energía de activación.
- Realizar las transformaciones de Kramers-Krönig.
- Transformar datos del dominio de tiempo al de frecuencia y viceversa.
- Calcular la conductividad DC y la permitividad a frecuencia infinita.
- Generar espectros teóricos.
- Modificar ficheros previamente salvados.

La metodología de trabajo para el procesamiento descansa en lo fundamental en la teoría de la respuesta dieléctrica universal para los sólidos.

El HELP que tiene incorporado brinda un conjunto de conceptos básicos, así como el modo de utilizar el programa.

ABSTRACT

To process and to present spectrometric data, a set of computer program has been made as a unique module which allows among other possibilities:

- To work with impedance, admittance, conductance, permittivity, susceptibility and current data.
- To draw spectra.
- To normalize spectra.
- To calculate activation energy.
- To realize Kramers-Krönig transformations.
- To transform frequency domain data to time domain data, and vice versa.
- To generate theoretical spectra.
- To modify previously saved files.

The methodology of work for the processing lies on the universal dielectric response theory extended to solids.

The module has in itself a HELP which supplies concepts, ways, of navigation, etc.

INTRODUCCION

El módulo que se presenta es usado para procesar los datos extraídos de las mediciones dieléctricas y se fundamenta en la teoría de la respuesta dieléctrica universal aplicada a los sólidos [1-20].

Se sabe que en el mundo de hoy el procesamiento de los datos juega un papel cada

vez mas importante, sin llegar a ser por supuesto, el eslabón fundamental de la espiral científica, sobre todo por la velocidad cada vez mayor con que se necesita conocer e interpretar los resultados experimentales a partir del instante en que se han efectuado las mediciones.

Por tal razón, a las exigencias tradicionales planteadas a los procesadores de datos, se suman día a día otras entre las que se señalan su

integralidad, correspondencia con las más actualizadas teorías, su elevado nivel práctico, su interacción con el usuario y la elegancia del diseño estético.

El conjunto de programas que aquí se presenta pretende cumplir con esas exigencias. Ante todo, basado en una amplia revisión bibliográfica, una parte de la cual se refiere aquí, se observó que no siempre los datos experimentales para el caso de los dieléctricos son representados del mismo modo, estando esto en gran medida directamente relacionado con los criterios y teoría sustentados por los autores.

Una variada gama de formas aparecen, desde la utilización del dominio de frecuencias [1-14,22,24-24,29-46] hasta el menos usado dominio de tiempos [1,2,5,7,15-20,28,42-44,46].

De la misma manera se suelen representar distintas magnitudes incluso dentro de un mismo dominio. En algunos casos se prefiere usar los planos complejos de impedancia [45], planteando en escala lineal Z'' vs Z' , en otros mientras tanto se prefiere plotear la permitividad (ϵ'' vs ϵ') [23,31,33-37,39,40,43-46], e incluso a veces la admitancia (Y'' vs Y'). El uso del tipo de escala es también variado. Aunque en los últimos tiempos se ha venido imponiendo la utilización de la escala Log-Log [1,20,22,24-26,29-32, 35,45] se ha usado y se usa la Semi-Log [21,27-28,33,34,36-38].

ALGORITMO Y METODOS

En el caso que nos ocupa, partiendo del reconocimiento de la validez de la teoría sobre la respuesta universal dieléctrica de los sólidos, el modo natural de representar los datos es la escala Log-Log, tanto en el dominio de tiempos como en el de frecuencias, y haciendo uso fundamentalmente de las magnitudes susceptibilidad, permitividad y capacitancia complejas.

No obstante, el módulo incorpora y admite el modo lineal y semi-log, así como otras magnitudes, entre ellas la impedancia, la admitancia y la conductividad.

Uno de los programas integrantes del módulo convierte, si se desea, los datos de una de estas magnitudes a otra cualquiera, dígame por ejemplo,

la impedancia a capacitancia o viceversa. A su vez tales datos salvados en un fichero permiten la realización de otros ficheros para trabajar en el plano complejo.

Otro programa permite modificar con rapidez y sentido práctico los ficheros previamente creados, mientras otro hace los gráficos deseados en la escala elegida por el usuario.

Los parámetros que caracterizan las curvas (p y n para el caso de dispersión fuerte a baja frecuencia, así como m y n para el caso dipolar) son calculados y ajustados. Se calculan además la llamada frecuencia crítica FC (si se tratase del dominio de frecuencias) o el tiempo crítico TC . (Para el dominio de tiempo)

Se normalizan también las curvas bajo análisis, salvando un fichero con los datos de la curva maestra y las coordenadas de los puntos representativos que pueden ser usados posteriormente para el cálculo de la energía de activación del proceso y para la corrección del valor absoluto en los espectros teóricos obtenidos previamente a partir de la función hipergeométrica. Esto último se puede hacer tanto para un proceso de dispersión fuerte como dipolar.

Ya que generalmente los datos obtenidos en las mediciones dieléctricas en el dominio de frecuencias están oscurecidos por la presencia de ciertas magnitudes como la conductividad DC, permitividad a frecuencia infinita, etc., se encuentra incorporado otro programa que realiza las transformaciones de Kramers-Krönig. Dichas transformaciones permiten obtener la parte imaginaria de la susceptibilidad a partir de su parte real y viceversa, eliminando del resultado, por ejemplo, la parte de las pérdidas correspondiente a la conducción DC. Con estos resultados se pueden calcular con facilidad las magnitudes "indeseadas" correspondientes, dígame conductividad DC, etc.

También es posible pasar la data en el dominio de tiempos al de frecuencias y viceversa. Para ello se calcula la transformada integral de Fourier. Con esta operación no sólo se logra aumentar los rangos de medición hasta donde no llegan los instrumentos, sino también en ocasiones poder visualizar mejor un efecto dado, como es el caso del fenómeno de las capacidades negativas.

CONCLUSIONES

La experiencia acumulada en el uso cotidiano de este módulo permite afirmar su versatilidad y sentido práctico. Los datos de algunos de los trabajos presentados a este VI Simposium de la Sociedad Cubana de Física [47,48,49] han sido procesados total o parcialmente usando este módulo.

AGRADECIMIENTOS

Por su ayuda desinteresada en algunas de las etapas de elaboración de los programas, agradecemos muy sinceramente al Dr. Luis Fuentes Cobas, al Lic. Alfredo Jacas y al Lic. Cesar Labafino.

REFERENCIAS

1. JONSCHER, A.K. (1984): Dielectric Relaxation in Solids. Chelsea Dielectric Press, London.
2. _____ (1983): Thin Solid Films, 100, 329-334.
3. DISSADO, L.A. (1982): Physica Scripta, T1, 110-114.
4. HILL, R., J. MATER (1981): Sci. 16, 118-124.
5. JONSCHER, A.K. (Aug.-1978): Nature, 256.
6. JONSCHER, A.K., J. MATER (1976): Mater. Sci. 13, 553-562.
7. OWEDE, E.F. and A.K. JONSCHER (Jul.-1988): J. Electrochem. Soc., 1757-1765.
8. JONSCHER, A.K. (1980): J. Phys. D: App., 13, Li 37-41.
9. CHAUDHRY, M.A., A.K. JONSCHER and R.M.HILL (1985): J. Phys., 18, 1207-1212.
10. JONSCHER, A.K. (Jun.-1988): IEEE Trans. Elect. Ins., 23, (3), 397-407.
11. CHAUDHRY, M.A., A.K. JONSCHER (1988): J. Mater. Sci., 23, 208-216.
12. JONSCHER, A.K. (Apr.-1988): IEEE Trans. Elect. Ins., 23, (2) 209-213.
13. _____ (Aug.-1990): IEEE Trans. Elect. Ins., 25(4), 622-629.
14. JONSCHER, A.K. and M.A. BARI (Jul.-1988): J. Electrochem. Soc. 1688-1695.
15. JONSCHER, A.K. and T. RAMDEEN (Feb.-1987): IEEE Trans. Elect. Ins., EI -22, (1) 33-39.
16. JONSCHER, A.K. (1986): J. Chem. Soc. Faraday Trans. 2, 82, 75-81.
17. JONSCHER, A.K. and A.R. HAYDAR (1986): J. Chem. Soc. Faraday Trans. 1, 82, 3553-3560.
18. GERHARD-MULTHANUP, R. (1987): IEEE Trans. Elect. Ins. EI-22, (5), 531-554.
19. WILLIAMS, R. (1974): Física de Aislantes. Editorial Trillas, Mexico.
20. BAUN, E.A. et al. (1987): J. Phys. D:Appl. Phys. 10, 487-497.
21. MELCHER, J. et al. (Sep.-1989): IEEE Elect. Trans. Ins., 24 (1) 31-38.
22. GROSS, B. (Jun.-1986): IEEE Elect. Trans. Ins. EI-21 (3) 249-269.
23. WOLFGANG GROSS, G. and R.M. Mc GEHEE (Jun.-1988): IEEE Elect. Trans. Ins. 23(3), 387-396.
24. WIKTORCZYK, T. (1988): Solid State Comm. 67(2), 143-144.
25. KWANG-SEI LEE and KYEONG-LIM KIN (Oct.-1991): J. Phys. Soc. Jpn. 60(10), 3207-3210.
26. ROELOFS, M.G. et al. (Jul.-1991): J. Appl. Phys. 70(2), 720-728.
27. BOUSE, D. and F. KREMER (1990): Am. Chem. Soc. Macromolecules 3, 829-835.
28. NOGUEIRAS, J.S. and R.M. FARIA (Sep.-1991): 7mo. Intern. Symp. Electrets.
29. BROUER, F. et al. (Aug.1987): Workin Party on Physics of Porous Media.

30. ABDULLAH, M.J. and D.K. DAS-GUPTA. (Jun.-1990): IEEE Trans. Elect. Ins. 25(3), 605-610.
31. CARRU, J.C. and Delafase (1982): Metal Microstructure in Zeolite, 221-227
32. CARRU, J.C. et al. (1984): Structure and Reactivity of Modify Zeolite, 337-343.
33. Szász, A. et al. (1988): Acta Chimika Hungarica 125(1), 37-48.
34. Ohgushi, T. (1988): Bull. Chem Soc. Jpn., 61, 1109-1113.
35. TABOURIER, P. et al. (1983): Zeolite 3, Jan. 50-55.
36. OHGUSHI, T. et al. (1988): Bull. Chem. Soc. Jpn., 61, 1797-1799.
37. OHGUSHI, T. et al. (1989): Bull. Chem. Soc. Jpn., 62, 1989, 2998-3000.
38. MORRIS, B. (1969): Phys. Chem. Solids, Pergamon Press, 30, 73-88.
39. SZASZ, A. and J. LISZI, (1991): Zeolite 11, 517-520.
40. CHAPOTON, A. et G. RAVALITERA (1975): Revue de Physique Appliquée. Tome 10, Mai, 153-164.
41. OHGUSHI, T. and K. SHIGEKI (1992): J. Coll. Int. Sci., 148(1), 148-154.
42. HEDVIG, P. (Oct.-1984): IEEE Trans. Elect. Ins. EI 19(5), 371-388.
43. WINTHE, H.J. (Feb.- 1990): IEEE Trans. Elect. Ins. 25(1), 27-44.
44. VAN ROGGEN, A., Ibidem.
45. ROSS McDONALD, J. (1987): Impedance Spectroscopy, John Wiley & Sons.
46. ALBELLA, J.M. y J.M. MARTIN (1984): Física de Dieléctricos. Marcombo, México.
47. Hernández Vélez, M. et al. (1994): Relajación Dieléctrica en Zeolitas. VI Simp. Soc. Cub. de Física.
48. HERNANDEZ VELEZ et al. (1994): Espectroscopía de Impedancia en Semiconductores. VI Simp. Soc. Cub. de Física. VI Simp. Soc. Cub. de Física.
49. ALVARADO, A et al. (1994): Obtención y caracterización de Cerámicas obtenidas a partir de Zeolitas modificadas. VI Simp. Soc. Cub. de Física. VI Simp. Soc. Cub. de Física.