

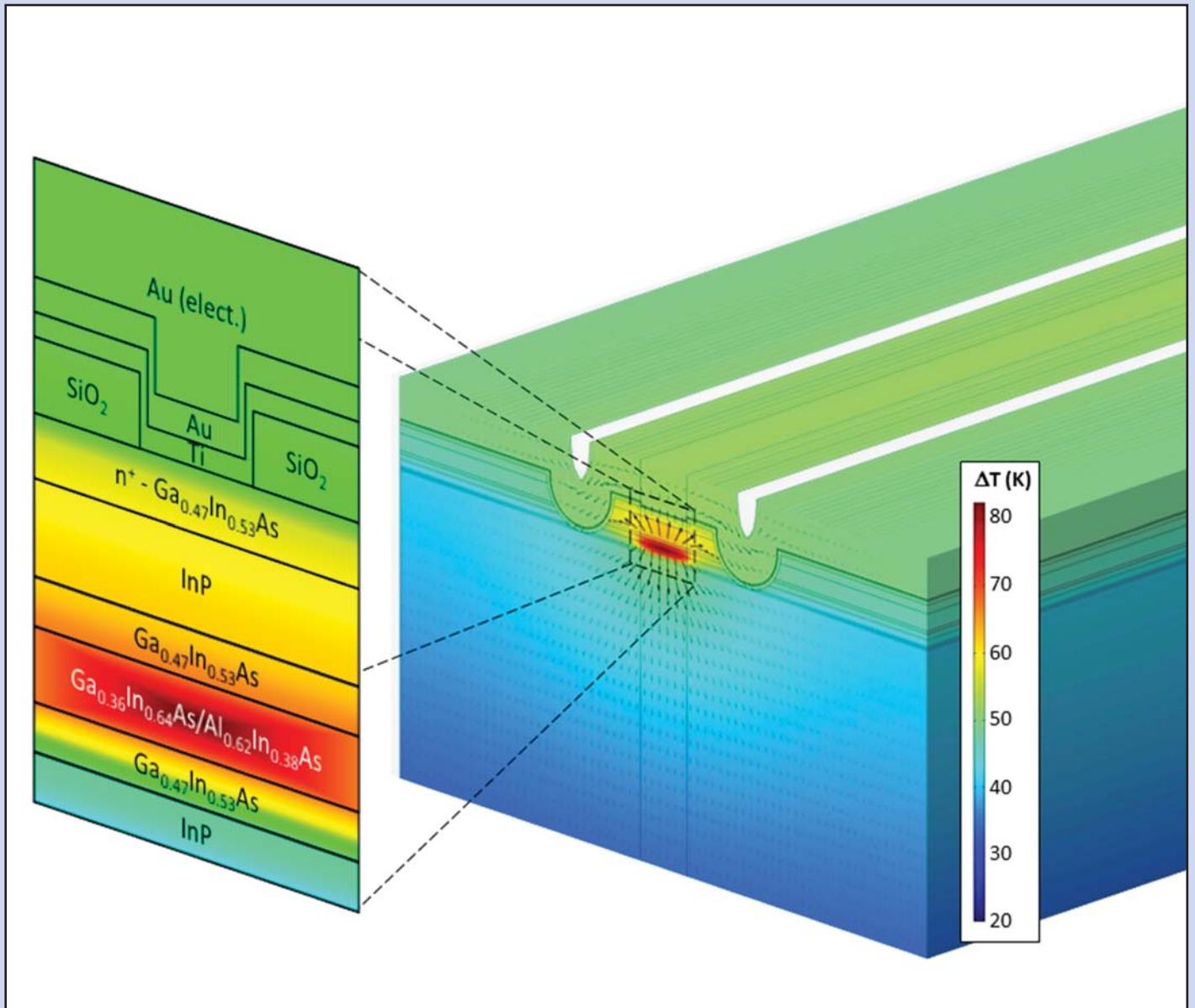
FÍSICA

REVISTA CUBANA DE FÍSICA

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

VOL. 32 No. 1
JULIO 15, 2015

LÁSERES SEMICONDUCTORES OPTIMIZADOS



En el Año Internacional de la Luz



EDITOR

E. ALTSHULER
Facultad de Física, Universidad de La Habana
10400 La Habana, Cuba
ealtshuler@fisica.uh.cu

EDICIÓN ELECTRÓNICA

R. CUAN
Facultad de Física, Universidad de La Habana
rcuan@fisica.uh.cu

J. J. GONZÁLEZ
Facultad de Física, Universidad de La Habana
jjgonzalez@fisica.uh.cu

EDITORES ASOCIADOS

A. J. BATISTA-LEYVA
Instec, La Habana
abatista@instec.cu

W. BIETENHOLZ
Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM
wolbi@nucleares.unam.mx

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

O. DÍAZ-RIZO
Instec, La Habana
odrizo@instec.cu

V. FAJER-ÁVILA
SCF, La Habana
vfajer@infomed.sld.cu

J. O. FOSSUM
NTNU, Trondheim
jon.foosum@ntnu.no

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

O. DE MELO
Facultad de Física, Universidad de La Habana
omelo@fisica.uh.cu

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

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

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

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

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

DISEÑO

ERNESTO ANTÓN
E. ALTSHULER

PORTADA: Esquema de un láser GaInAs de cascada cuántica optimizado para mejorar la disipación térmica (ver artículo en la página 15).

COORDENADAS

- 1 CUBA EN EL AÑO INTERNACIONAL DE LA LUZ
L. M. Méndez Pérez (Ed. E. Altshuler)

ARTÍCULOS ORIGINALES

- 3 UN MODELO DE LA SUBIDA DEL AIRE OCASIONADA POR LA CONDENSACIÓN DE VAPOR Y SU CÁLCULO NUMÉRICO
[A MODEL FOR THE AIR RISE CAUSED BY THE WATER VAPOR CONDENSATION AND ITS NUMERICAL COMPUTATION]
S. Ghomrani, J. Marín-Antuña y H. Fujita Yashima (Ed. A. J. Batista-Leyva)
- 9 MAGNETIC BEHAVIOR OF THE ALLOY $(\text{CuInTe}_{2-x})(\text{TaTe})_x$ WITH $x = 0.25$
[COMPORTAMIENTO MAGNÉTICO DE LA ALEACIÓN $(\text{CuInTe}_{2-x})(\text{TaTe})_x$ CON $x = 0.25$]
P. Grima-Gallardo, O. Izarra, R. Peña, M. Muñoz, S. Durán, M. Quintero, E. Quintero y H. Romero (Ed. E. Altshuler)
- 15 ANALYSIS OF THE THERMAL PROPERTIES OF GaInAs QUANTUM CASCADE LASERS
[ANÁLISIS DE LAS PROPIEDADES TÉRMICAS DE LÁSERES DE CASCADA CUÁNTICA DE GaInAs]
O. Concepción, A. Abelenda, J. C. González y M. Sánchez (Ed. W. Bietenholtz)
- 20 ESTADOS CUASI-ESTACIONARIOS DE HUECOS EN UNA HETEROESTRUCTURA SEMICONDUCTORA A CAPAS: TIEMPOS DE VIDA Y AUTOENERGÍAS
[QUASI-BOND STATES OF HOLES IN A LAYERED SEMICONDUCTOR HETEROSTRUCTURE: LIFE TIMES AND EIGENENERGIES]
M. A. Hernández y L. Diago-Cisneros (Ed. R. Mulet)
- 26 FAST COMPUTATION OF HYDRODYNAMIC GREEN'S FUNCTION
[CÁLCULO RÁPIDO DE LA FUNCIÓN DE GREEN HIDRODINÁMICA]
Mohamed M. S. Nasser (Ed. T. Poeschel)
- 33 CAMBIOS DE FASE POR REFLEXIÓN DE LA LUZ EN UN DIELECTRICO
[PHASE CHANGES OF LIGHT ON REFLECTION FROM A DIELECTRIC]
A. J. Batista-Leyva y A. R. Batista-Tomás (Ed. V. Fajer)
- 37 VELOCITY PROFILE OF GRANULAR FLOWS DOWN A HEAP DESCRIBED BY DIMENSIONAL ANALYSIS
[PERFIL DE VELOCIDADES DE UN FLUJO GRANULAR EN UNA PILA DESCRITO POR ANÁLISIS DIMENSIONAL]
E. Martínez, O. Sotolongo-Costa, A. J. Batista-Leyva and E. Altshuler (Ed. P. Muné)
- 42 ON THE NATURE OF THE L-TYPE Ca^{2+} CURRENT INACTIVATION IN RAT VENTRICULAR CARDIOMYOCYTES
[ACERCA DE LA NATURALEZA DE LA INACTIVACION DE LA CORRIENTE DE Ca^{2+} TIPO L EN CARDIOMIOCITOS VENTRICULARES DE RATA]
J. Álvarez-Collazo, M. Sampedro-Castañeda, L. Galán Martínez, A. I. López-Medina, G. Vassort and J. L. Álvarez (Ed. E. Altshuler)
- COMUNICACIONES ORIGINALES**
- 49 SIMPLE CELLULAR AUTOMATA TO MIMIC FORAGING ANTS SUBMITTED TO ABDUCTION
[AUTÓMATAS CELULARES SIMPLES PARA MODELAR HORMIGAS QUE FORRAJEAN SOMETIDAS A ABDUCCIÓN]
F. Tejera y E. Altshuler (Ed. O. de Melo)
- 53 ON THE PENETRATION AND TRAPPING OF THE MAGNETIC FLUX IN Bi-2223 SUPERCONDUCTORS
[SOBRE LA PENETRACIÓN Y ATRAPAMIENTO DEL FLUJO MAGNÉTICO EN SUPERCONDUCTORES DE Bi-2223]
P. Muné, M. Hernández-Wolpez, A. Cruz-García and R. J. Jardim (Ed. E. Altshuler)
- 56 ENTROPIC FACTOR AS A POTENTIAL MOLECULAR DESCRIPTOR
[FACTOR ENTRÓPICO, UN DESCRIPTOR MOLECULAR POTENCIAL]
Yoana Pérez-Badell and José Manuel Nieto-Villar (Ed. E. Altshuler)

59 NUESTRA FÍSICA EN NOTICIAS

COMENTARIOS

- 67 CARTA AL EDITOR: ACERCA DEL MENSAJE DE LA PRESIDENTA DE LA SOCIEDAD CUBANA DE FÍSICA, PUBLICADO EN LA REVISTA CUBANA DE FÍSICA 31, 59 (2014)
[LETTER TO THE EDITOR: ON THE MESSAGE OF THE PRESIDENT OF THE SOCIEDAD CUBANA DE FÍSICA PUBLISHED IN THE REVISTA CUBANA DE FÍSICA 31, 59 (2014)]
D. J. Alamino-Ortega (Ed. E. Altshuler)

CUBA EN AÑO INTERNACIONAL DE LA LUZ

L. M. MÉNDEZ PÉREZ

Departamento de Física, Facultad de Ciencias Naturales, Universidad de Oriente, Santiago de Cuba, Cuba. lmendezp@cnt.uo.edu.cu
Vicepresidente Sociedad Cubana de Física.



En la 190ª reunión el Consejo Ejecutivo de la Organización de las Naciones Unidas para la Educación, la Ciencia y la Cultura (UNESCO), se acordó proclamar el 2015 Año Internacional de la Luz y de las tecnologías basadas en la luz, sobre la base de una propuesta de los gobiernos de Ghana, México, la Federación de Rusia y Nueva Zelanda¹.

La proclamación del año 2015 como Año Internacional de la Luz y las Tecnologías Basadas en la Luz, se sustenta en la feliz coincidencia en este año de los aniversarios de varios hitos relacionados con la luz que se remontan al primer milenio, en que se publicaran los grandes trabajos de Ibn al-Haytham sobre la óptica, en la Edad de Oro islámica (1015); el bicentenario del momento cuando Fresnel, en Francia, expuso la teoría del carácter ondulatorio de la luz (1815); el centenario y medio de la formulación en Inglaterra por Maxwell de la teoría electromagnética de la luz (1865); el centenario del desarrollo por Einstein en Alemania de la teoría de la Relatividad General que confirmó el papel central de la luz en el espacio y en el tiempo (1915); y el medio centenario del descubrimiento en los Estados Unidos por Penzias y Wilson del fondo cósmico de microondas, eco de la creación del universo (1965).

La Sociedad Cubana de Física (SCF), en la reunión de su Junta Directiva celebrada el 11 de febrero del 2015, hizo suya la proclamación de la Asamblea General de las Naciones Unidas de señalar al 2015 como Año Internacional de la Luz y las Tecnologías Basadas en la Luz y publicó su propia declaración a inicios del mes de abril², cuyo texto íntegro se puede consultar en la sección de noticias de este número. Es objetivo de la SCF reflejar en nuestro país los propósitos declarados por la UNESCO, y de aprovechar esta oportunidad sin precedentes para destacar la continuidad de los descubrimientos científicos en diferentes contextos, con un énfasis especial en la promoción de la enseñanza de las ciencias fundamentales. La celebración de estos hechos es para la SCF una excelente ocasión para llevar a cabo diversas actividades educativas y de divulgación de la cultura científica en todo el país.

Entre ellas se destaca el concurso de fotografía científica "CienciArte 2015"³ donde se podrán presentar imágenes con contenido científico que resalten algún aspecto de la luz como protagonista de diversas actividades humanas. Se realizará también el concurso de diseño de demostraciones o experimentos de óptica "DemoExpeOptica 2015", utilizando materiales que estén al alcance de todos⁴. Las premiaciones se efectuarán en enero del 2016 y en diciembre del 2015, celebrando el día de la Física en Cuba y el 45 aniversario de la primera graduación de Ingenieros Físicos en la Universidad de Oriente, respectivamente.

En el momento de la escritura de estas Coordinadas, ya se habían realizado en Cuba varias actividades asociadas al Año Internacional de la Luz. Por ejemplo, la Tercera Olimpiada Nacional Universitaria de Física (ONUF) realizada el 27 de Marzo de 2015, coauspiciada por la SCF y la Facultad de Física de la Universidad de la Habana (ver noticia correspondiente en este número). También la XXXI Jornada Científica Estudiantil de la Facultad de Física de la Universidad de la Habana. Además, la celebración, del 13 al 16 de mayo, del *Fourth International Symposium on Strong Electromagnetic Fields and Neutron Stars*, dedicado a los 100 Años de la publicación por Einstein de los trabajos que dieron pie a la Teoría de la Relatividad General. En el IMRE (Universidad de La Habana), los días 28 y 29 de abril se dictaron conferencias como promoción a las tareas científicas en Óptica y Fotónica por especialistas del Centro de Investigaciones en Óptica, ubicado en la ciudad de León, Guanajuato, México.

En lo que resta de año, se realizarán actividades coordinadas entre el Museo de Historia Natural "Tomás Romay", los departamentos de Física de la Universidad de Oriente y la Sociedad Cubana de Física para realizar en el verano y en los meses siguientes en Santiago de Cuba un Ciclo de charlas científicas sobre la luz en dicho Museo y el "Show de la Física" con experimentos y demostraciones sobre la luz en el Parque Serrano, en la céntrica calle Enramada de esta urbe oriental.

Con estos esfuerzos, la SCF pretende que todos los cubanos reciban la luz con el asombro y curiosidad con que lo hacemos nosotros, los físicos.

¹ La propuesta contó, además, con el patrocinio y el apoyo de Angola, Bangladesh, Brasil, Burkina Faso, China, Congo, Cuba, Chile, Djibouti, Ecuador, Etiopía, Gabón, Gambia, Indonesia, Italia, Malawi, Nigeria, Perú, la República de Corea, Arabia Saudita, España, Tailandia, Túnez, los Emiratos Árabes Unidos, los Estados Unidos de América, Venezuela y Zimbabue.

² <http://scf.fisica.uh.cu/index.php/en/noticias/89-noticias2/310-declaracion-de-la-scf-por-el-ano-internacional-de-la-luz>.

³ <http://www.fisica.uh.cu/scf/index.php/en/84-eventos/311-cienciarte-2015>

⁴ <http://scf.fisica.uh.cu/index.php/en/84-eventos/311-cienciarte-2015>

UN MODELO DE LA SUBIDA DEL AIRE OCASIONADA POR LA CONDENSACIÓN DEL VAPOR Y SU CÁLCULO NUMÉRICO

A MODEL OF THE AIR RISE CAUSED BY THE WATER VAPOR CONDENSATION AND ITS NUMERICAL COMPUTATION

S. GHOMRANI^{a*}, J. MARÍN ANTUÑA^{b†} Y H. FUJITA YASHIMA^{a†}

a) Laboratoire de Math. Appl. Modélisation, Université de Guelma, Algérie. sarra.ghomrani@hotmail.fr*, hisao.fujitayashima@unito.it†

b) Facultad de Física, Universidad de La Habana, Cuba. marin@fisica.uh.cu†

† autor para la correspondencia

Recibido 16/10/2014; Aceptado 26/12/2014

Se propone un sistema de ecuaciones que describe el desarrollo de la subida del aire ocasionada por el calor latente de la condensación del vapor de agua en un cilindro vertical de unos 10 km de altura. El resultado del cálculo muestra un desarrollo muy rápido de la corriente ascendente y su estabilización por efecto de la fricción de las gotitas producidas por la condensación del vapor de agua en el aire.

We propose a system of equations to describe the development of the air rise caused by the water vapor condensation latent heat in a vertical cylinder of 10 km of height. The calculus results show a very fast development of the rising flow and its stabilization due to the friction of the droplets given by the water vapor condensation in the air.

PACS: Atmosphere: pressure, density and temperature, 92.60.hv; Water in the atmosphere, 92.60.Jq; Storms, 92.60.Qx; Partial differential equations, 02.30.Jr; Fluid dynamics: finite difference methods, 47.11.Bc

I INTRODUCCIÓN

Como es bien conocido, la subida del aire ocasionada por el calor latente de la condensación del vapor de agua juega un papel fundamental en los fenómenos de la torre cálida, formando el cúmulonimbo y provocando la tormenta y la precipitación intensa o convirtiéndose en el núcleo cálido del huracán (véanse por ejemplo [1], [2], entre otros). La mayoría de los trabajos sobre tormentas tropicales desarrollan modelos que estudian los sistemas ya con cierto grado de madurez, lo que es posible ver en trabajos tales como [3], [4], [5], [6] entre otros. La literatura en este tema es muy amplia, pero no abundan los trabajos que desarrollen con suficiente amplitud la fase inicial de formación de las tormentas tropicales. En el presente trabajo proponemos un sistema de ecuaciones que describe el desarrollo del movimiento ascendente del aire ocasionado por el calor latente de la condensación del vapor de agua, suponiendo que el movimiento del aire se desarrolla en un cilindro vertical elevado. Naturalmente, en la naturaleza no existe una estructura análoga, sino solamente en nuestra imaginación podemos construir una chimenea de unos 10 kilómetros de altura. Aunque sea un experimento puramente virtual, para comprender el aspecto esencial del fenómeno, nos parece útil analizar este modelo de la subida del aire. En efecto, gracias a la simplicidad de la estructura geométrica del cilindro vertical, podemos calcular bastante bien el desarrollo del flujo vertical del aire, incluyendo la estabilización por el efecto de la fricción de las gotitas producidas por la salida del aire húmedo.

Para el cálculo hemos utilizado una aproximación para la separación del sistema de ecuaciones en una parte que

describe el desarrollo en el tiempo t y la que determina la estructura espacial como una estructura casi estacionaria. Esta separación nos permite utilizar un esquema de diferencias finitas bastante simple, que da un resultado claro.

II ECUACIONES DEL MOVIMIENTO DEL AIRE CON LA CONDENSACIÓN DEL VAPOR DE AGUA

Como decíamos arriba, proponemos la descripción del desarrollo de la corriente vertical del aire por el calor latente de la condensación, corriente en un cilindro vertical muy elevado. Imaginemos una “chimenea” de unos 10 kilómetros, que es un cilindro regular con una sección constante y bastante ancha, por ejemplo con un diámetro entre 1 y 2 kilómetros (como en muchos casos de chubascos), y en ella una corriente ascendente del aire húmedo que provoca la condensación del vapor como en una “torre cálida”. La presencia de la pared de la chimenea, o la inhomogeneidad de la condición inicial, podría provocar una no uniformidad de la velocidad en distintos valores de la altura. Pero, dado que la pared es paralela a la corriente principal, si el flujo entrante es uniforme, el movimiento irregular en el flujo se reduce a él en la capa límite, cuyo espesor se disminuye en función de la pequeñez de la viscosidad (véase por ejemplo [7], cap. IV). Por eso, en este trabajo, que trata una corriente del aire con viscosidad muy pequeña en un cilindro muy ancho sin obstáculos, despreciamos la inhomogeneidad que se puede crear en la vecindad de la pared y estudiaremos los aspectos de la corriente principal en el cilindro. Es decir, para formular las ecuaciones, despreciando las componentes horizontales de la velocidad y las variaciones de las magnitudes físicas

en las direcciones horizontales, consideraremos solamente la componente de la velocidad $v = v_3$ y solamente la variable vertical z como coordenada espacial, de manera que las ecuaciones se considerarán en el dominio

$$0 < z < \bar{z}_1, \quad t > 0,$$

donde $\bar{z}_1$ representará la altura del cilindro.

Para formular las ecuaciones, partimos desde las ecuaciones en derivadas parciales de la mecánica de los fluidos (véase por ejemplo [7]) y les añadimos los términos debidos a la transición de fase del agua. Denotemos por $H_{tr} = H_{tr}(x, t)$ la cantidad de H_2O en estado gaseoso que se transforma en líquido o sólido, por L_{tr} el calor latente y por $\Sigma = \Sigma(x, t)$ la cantidad de agua líquida o sólida presente en el aire (en la forma de gotitas o pedazos de hielo).

Reduciendo las ecuaciones a una dimensión espacial, tenemos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}(\rho v) = -H_{tr}, \quad (1)$$

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial z} \right) = \mu \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial z} p - g[\Sigma + \rho], \quad (2)$$

$$\rho c_v \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v \frac{\partial T}{\partial z} \right) + p \frac{\partial v}{\partial z} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 + L_{tr} H_{tr}, \quad (3)$$

donde μ y κ son el coeficiente de viscosidad y el de conductividad térmica.

Si además ponemos

$$p = R_1 \rho T \quad (4)$$

como en el caso del gas ideal, y si sustituimos (4) en (3), tenemos

$$\rho c_v \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v \frac{\partial T}{\partial z} \right) + R_1 \rho T \frac{\partial v}{\partial z} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 + L_{tr} H_{tr}. \quad (5)$$

Si además sustituimos

$$\rho \frac{\partial v}{\partial z} = -\partial_t \rho - v \partial_z \rho - H_{tr}$$

(que resulta de (1)) en (5), se obtiene

$$\begin{aligned} & \rho c_v \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v \frac{\partial T}{\partial z} \right) - R_1 T \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + v \frac{\partial \rho}{\partial z} \right) = \\ & = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 + (R_1 T + L_{tr}) H_{tr}. \end{aligned} \quad (6)$$

Ahora determinamos la cantidad H_{tr} como sigue. Denotemos por $\bar{\pi}_{vs}(T)$ la densidad del vapor saturado (que podemos considerar como una función de la temperatura T). Supongamos que la cantidad de H_2O que sobrepasa $\bar{\pi}_{vs}(T)$ se convierte inmediatamente en líquido o sólido. Entonces, si denotamos por $\pi(z)$ la densidad del vapor en el punto z ,

considerando la temperatura T como función de z , en cada punto z tenemos

$$\pi(z) = \bar{\pi}_{vs}(T(z)).$$

Cuando el aire sube de Δz , la cantidad de H_2O que estaba en estado gaseoso en el punto z será, en la unidad de volumen, aproximadamente

$$\pi(z) \frac{\rho(z + \Delta z)}{\rho(z)} = \bar{\pi}_{vs}(T(z)) \frac{\rho(z + \Delta z)}{\rho(z)},$$

mientras que la densidad del vapor saturado será

$$\bar{\pi}_{vs}(T(z + \Delta z)).$$

Por eso, tenemos

$$\begin{aligned} & \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta z} \left[\pi(z) \frac{\rho(z + \Delta z)}{\rho(z)} - \bar{\pi}_{vs}(T(z + \Delta z)) \right] \\ & = \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta z} \left[\bar{\pi}_{vs}(T(z)) \left(\frac{\rho(z + \Delta z)}{\rho(z)} - 1 \right) \right. \\ & \quad \left. - \left(\bar{\pi}_{vs}(T(z + \Delta z)) - \bar{\pi}_{vs}(T(z)) \right) \right] \\ & = \bar{\pi}_{vs}(T) \frac{d}{dz} \log \rho - \frac{d}{dz} \bar{\pi}_{vs}(T). \end{aligned}$$

Por lo tanto, teniendo cuenta de la relación $\frac{dz}{dt} = v$, podemos poner

$$H_{tr} = \left(\bar{\pi}_{vs}(T) \frac{d}{dz} \log \rho - \frac{d}{dz} \bar{\pi}_{vs}(T) \right) v. \quad (7)$$

Ahora volvamos a la ecuación (2), para la cual hasta ahora no hemos comentado las condiciones en los extremos del dominio $0 < z < \bar{z}_1$. Como se ve por el cálculo, dentro de la chimenea hay un aire más caliente que en el exterior y por eso también la presión es más grande que la del exterior. Más precisamente, si en el nivel $z = 0$, la presión en la chimenea es igual a la del exterior, en la cima $z = \bar{z}_1$ habrá una diferencia de presión entre el interior y el exterior; en esta situación el aire que sale desde la cima de la chimenea se extendería muy rápidamente y la presión se reduciría al nivel de la presión del exterior. Si traducimos este efecto en el modelo del movimiento del aire dentro de la chimenea, podemos considerarlo como una fuerza f , que, en el dominio $0 < z < \bar{z}_1$, correspondería al gradiente de presión de base creado por la condición del exterior. Por eso, si denotamos por p_{ex} la presión del exterior y si, de acuerdo con (4), consideramos que la presión en la cima $p(t, \bar{z}_1)$ es igual a $R_1 \rho(t, \bar{z}_1) T(t, \bar{z}_1)$, la función $f = f(t, z)$ tiene que satisfacer la relación

$$\int_0^{\bar{z}_1} f(t, z) dz = R_1 \rho(t, \bar{z}_1) T(t, \bar{z}_1) - p_{ex}. \quad (8)$$

Como en nuestro modelo no hay elementos para determinar una distribución particular de f en $0 < z < \bar{z}_1$, aquí consideramos una distribución casi homogénea (para la aproximación de f para el cálculo, véase (17)). Así añadimos el término f a la parte derecha de (2), en la cual sustituimos también (4).

Resumiendo, el sistema de ecuaciones que tenemos que considerar es

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}(\varrho v) = -H_{tr}, \quad (9)$$

$$\varrho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial z} \right) = \mu \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} - R_1 \frac{\partial}{\partial z}(\varrho T) - g[\Sigma + \varrho] + f, \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \varrho c_v \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v \frac{\partial T}{\partial z} \right) - R_1 T \left(\frac{\partial \varrho}{\partial t} + v \frac{\partial \varrho}{\partial z} \right) = \\ = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 + (R_1 T + L_{tr}) H_{tr}, \end{aligned} \quad (11)$$

donde H_{tr} es dado por (7).

Si despreciamos la viscosidad y la conductividad térmica, las ecuaciones (10) y (11) se reducen a

$$\varrho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial z} \right) = -R_1 \frac{\partial}{\partial z}(\varrho T) - g[\Sigma + \varrho] + f, \quad (12)$$

$$\varrho c_v \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v \frac{\partial T}{\partial z} \right) - R_1 T \left(\frac{\partial \varrho}{\partial t} + v \frac{\partial \varrho}{\partial z} \right) = (R_1 T + L_{tr}) H_{tr}. \quad (13)$$

III SEPARACIÓN DE LA EVOLUCIÓN TEMPORAL Y DE LA ESTRUCTURA VERTICAL Y OTRAS APROXIMACIONES

No es fácil resolver el sistema de ecuaciones (9)-(11) con (7) y con Σ que tenemos que definir todavía. Por eso, antes de todo introducimos una aproximación particular, que es la separación de la evolución temporal y de la estructura vertical. Pongamos

$$v = \alpha(t)w(t, z) \quad (14)$$

y supongamos que

$$\partial_t \varrho(t, z) \approx 0, \quad \partial_t T(t, z) \approx 0, \quad \partial_t w(t, z) \approx 0. \quad (15)$$

La hipótesis (15) significa que se supone que, fijando $\alpha(t)$, es decir, una vez fijada la magnitud característica α de la velocidad, la densidad, la temperatura y la velocidad deben constituir un estado casi estacionario; en efecto el sistema (20), (23), (24) (véase abajo) puede representar el estado hidrostático con condensación del vapor y con efecto de la caída de gotitas.

Con las aproximaciones (14)-(15) la ecuación (10) se convierte en

$$\varrho w \frac{d}{dt} \alpha + \varrho \alpha^2 w \partial_z w = \mu \alpha \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} - R_1 \frac{\partial}{\partial z}(\varrho T) - g[\Sigma + \varrho] + f. \quad (16)$$

Por otra parte, nos es conveniente adoptar la aproximación de $f(t, z)$ dada por

$$f(t, z) = \varrho(t, z)w(t, z) \frac{p(t, \bar{z}_1) - p_{ex}}{\int_0^{\bar{z}_1} \varrho(t, z')w(t, z')dz'}. \quad (17)$$

Se ve que esta función $f(t, z)$ satisface (8) y se verá también que, dado que la variación en z de $\varrho(t, z)w(t, z)$ es bastante pequeña, la de $f(t, z)$ será también pequeña. Sustituyendo (17) en (16), tenemos

$$\begin{aligned} \varrho w \frac{d}{dt} \alpha + \varrho \alpha^2 w \partial_z w = \\ = \mu \alpha \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} - R_1 \frac{\partial}{\partial z}(\varrho T) - g[\Sigma + \varrho] + \varrho w \frac{p(t, \bar{z}_1) - p_{ex}}{\int_0^{\bar{z}_1} \varrho(t, z')w(t, z')dz'}, \end{aligned}$$

o sea, la ecuación (16) se convierte en

$$\frac{d}{dt} \alpha(t) = \frac{p(t, \bar{z}_1) - p_{ex}}{\int_0^{\bar{z}_1} \varrho(t, z')w(t, z')dz'},$$

$$\varrho \alpha^2 w \partial_z w = \mu \alpha \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} - R_1 \frac{\partial}{\partial z}(\varrho T) - g[\Sigma + \varrho].$$

En lo que concierne a $\Sigma(t, z)$, su estimación resulta muy difícil; nos parece que es casi imposible determinarla por una deducción teórica. Esperando los datos de observación con que se definirá $\Sigma(t, z)$ de manera más coherente físicamente, en el presente experimento numérico, vamos a utilizar la aproximación

$$\begin{aligned} \Sigma(t) &= \frac{1}{\bar{z}_1} \int_0^t \varphi(t-s) \int_0^{\bar{z}_1} H_{tr}(z, s) dz ds \\ &= \frac{1}{\bar{z}_1} \int_0^t \varphi(t-s) \int_0^{\bar{z}_1} \left(\bar{\pi}_{vs}(T) \frac{d}{dz} \log \varrho - \frac{d}{dz} \bar{\pi}_{vs}(T) \right) v dz ds \end{aligned} \quad (18)$$

con una función conveniente φ , que representaría la probabilidad de gotitas o de pedazos de hielo de quedar en el aire. En efecto, si $\varphi(t-s)$ es la probabilidad de quedar en el dominio $0 < z < \bar{z}_1$ del agua líquida o sólida producida en el momento s , la cantidad $\Sigma(t)$ definida por (18) será el promedio (en $0 < z < \bar{z}_1$) de la masa total del agua líquida o sólida presente en el aire en el momento t .

Por fin interpretando (15) como la posibilidad de considerar las funciones ϱ, T, w como funciones de z con un parámetro t , escribimos $\varrho(t; z), T(t; z), w(t; z)$ y también $\frac{d\varrho}{dz}, \frac{dT}{dz}, \frac{dw}{dz}$ en lugar de $\frac{\partial \varrho}{\partial z}, \frac{\partial T}{\partial z}, \frac{\partial w}{\partial z}$. Así el problema se convierte en

$$\frac{d}{dt} \alpha(t) = \frac{R_1 \varrho(t; \bar{z}_1) T(t; \bar{z}_1) - p_{ex}}{\int_0^{\bar{z}_1} \varrho(t; z') w(t; z') dz'}, \quad (19)$$

$$w \frac{d\varrho}{dz} + \varrho \frac{dw}{dz} = - \left(\bar{\pi}_{vs}(T) \frac{d}{dz} \log \varrho - \frac{d}{dz} \bar{\pi}_{vs}(T) \right) w, \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \varrho c_v \frac{dT}{dz} - R_1 T \frac{d\varrho}{dz} - \frac{\kappa}{\alpha(t)w} \frac{d^2 T}{dz^2} = \frac{\mu \alpha(t)}{w} \left(\frac{dw}{dz} \right)^2 + \\ + (R_1 T + L_{gl}) \left(\bar{\pi}_{vs}(T) \frac{1}{\varrho} \frac{d}{dz} \varrho - \frac{d}{dT} \bar{\pi}_{vs}(T) \frac{dT}{dz} \right), \end{aligned} \quad (21)$$

$$\alpha(t)^2 \varrho w \frac{dw}{dz} + R_1 \varrho \frac{dT}{dz} + R_1 T \frac{d\varrho}{dz} - \mu \alpha(t) \frac{d^2 w}{dz^2} = -g \varrho - g \frac{1}{\bar{z}_1} \int_0^t \varphi(t-s) \int_0^{\bar{z}_1} \left(\bar{\pi}_{vs}(T) \frac{d}{dz} \log \varrho - \frac{d}{dz} \bar{\pi}_{vs}(T) \right) \alpha w dz ds. \quad (22)$$

Ya que nos interesa el desarrollo del corriente ascendente del aire, consideramos sólo el caso en que $v = \alpha w$ es positiva y no es demasiado pequeña (de manera que en (21) $\frac{\kappa}{\alpha(t)w}$ queda relativamente pequeño).

Si despreciamos la viscosidad y la conductividad térmica, las ecuaciones (21) y (22) se reducen a

$$\varrho c_v \frac{dT}{dz} - R_1 T \frac{d\varrho}{dz} = (R_1 T + L_{gl}) \left(\bar{\pi}_{vs}(T) \frac{1}{\varrho} \frac{d}{dz} \varrho - \frac{d}{dT} \bar{\pi}_{vs}(T) \frac{d}{dz} T \right), \quad (23)$$

$$\alpha(t)^2 \varrho w \frac{dw}{dz} + R_1 \varrho \frac{dT}{dz} + R_1 T \frac{d\varrho}{dz} = -g \varrho - g \frac{1}{\bar{z}_1} \int_0^t \varphi(t-s) \times \int_0^{\bar{z}_1} \left(\bar{\pi}_{vs}(T) \frac{d}{dz} \log \varrho - \frac{d}{dz} \bar{\pi}_{vs}(T) \right) \alpha w dz ds. \quad (24)$$

IV ELECCIÓN DE PARÁMETROS Y ESQUEMA NUMÉRICO

Para efectuar el cálculo, tenemos que precisar algunos parámetros que intervienen en las ecuaciones. Los parámetros físicos g , R_1 , c_v son

$$g = 9.8 \text{ } g m^2 / s^2, \quad R_1 = \frac{R}{\mu_m}, \quad c_v = \frac{5}{2} \frac{R}{\mu_m},$$

$$R = 8,31 \cdot 10^7 \text{ } erg / mol \cdot K, \quad \mu_m = 28,96 \text{ } g / mol.$$

En el cálculo utilizamos para la densidad del vapor saturado $\bar{\pi}_{vs}(T)$ su valor relativo a la superficie líquida

$$\bar{\pi}_{vs}(T) = \frac{\mu_h}{RT} E_0 \cdot 10^{\frac{7,63(T-273,15)}{T-31,25}},$$

$$\mu_h = 18,01 \text{ } (g/mol), \quad E_0 = 6,107 \text{ } (mbar),$$

y para el calor latente L_{tr} su valor relativo a la transición gas-líquido

$$L_{gl}(T) \approx (3244 - 2,72 T) 10^3 \text{ } (J/kg).$$

La corrección de estas funciones por la consideración de la presencia de la transición de fase gas-sólido requiere cálculos bastante complicados pero no modificará mucho el resultado del cálculo (para estos coeficientes véanse por ejemplo [8], [9], [10], [11]). Para el coeficiente de viscosidad y el de conductividad térmica, véanse comentarios detrás de la Fig. 5 en bajo.

Para la presión en el exterior p_{ex} en la cima, en el ejemplo de simulación de este trabajo, utilizamos

$$p_{ex} = R_1 \varrho_{sc}(\bar{z}_1) T_{sc}(\bar{z}_1),$$

donde $T_{sc}(z)$ y $\varrho_{sc}(z)$ son las funciones de la temperatura y de la densidad del aire en el estado hidrostático (sin condensación), es decir

$$T_{sc}(z) = T(0) - \frac{g(\gamma-1)}{R_1 \gamma} z, \quad \frac{g(\gamma-1)}{R_1 \gamma} \approx 9,8 \text{ } ^\circ K / km,$$

$$\varrho_{sc}(z) = \left(\varrho(0)^{\gamma-1} - \frac{\gamma-1}{\gamma h} g z \right)^{\frac{1}{\gamma-1}},$$

$$\gamma = \frac{R_1 + c_v}{c_v} \quad (\gamma \text{ es el exponente adiabático}),$$

$$h = \text{constante} = \frac{(R_1 T(0))^\gamma}{\bar{p}_0^{\gamma-1}}, \quad \bar{p}_0 = 1013 \text{ } mb.$$

En lo que concierne a la función $\varphi(\cdot)$, en nuestro ejemplo de cálculo proponemos

$$\varphi(\tau) = \exp\left(-\frac{\pi \tau^2}{4(1200)^2}\right), \quad \tau \geq 0.$$

Dado que $\int_0^\infty \exp\left(-\frac{\pi \tau^2}{4(1200)^2}\right) d\tau = 1200$, la elección de esta función corresponde a la estimación de que el promedio del tiempo de permanencia de gotitas o pedazos de hielo en el aire sea 20 minutos (= 1200 segundos).

Para realizar la simulación de un caso, escogemos

$$0 \leq z \leq 12000 \text{ } (m), \quad 0 \leq t \leq 3600 \text{ } (s),$$

$$\alpha(0) = 0.01 \text{ } (m/s), \quad T(t; 0) = 300 \text{ } (K),$$

$$\varrho(t; 0) = 1204 \text{ } (g/m^3), \quad w(t; 0) = 1.$$

Para construir el esquema numérico, discretizamos los intervalos $0 \leq t \leq \bar{t}_1 = 2000 \text{ } (s)$ y $0 \leq z \leq \bar{z}_1 = 12000 \text{ } (m)$ por $\{t_i\}_{i=0}^{N_1}$ y $\{z_j\}_{j=0}^{N_2}$ con pasos δ_t y δ_z , es decir

$$0 = t_0 < t_1 < \dots < t_{N_1-1} < t_{N_1} = \bar{t}_1,$$

$$t_i - t_{i-1} = \delta_t \quad \forall i \in \{1, \dots, N_1\}, \quad (25)$$

$$0 = z_0 < z_1 < \dots < z_{N_2-1} < z_{N_2} = \bar{z}_1,$$

$$z_j - z_{j-1} = \delta_z \quad \forall j \in \{1, \dots, N_2\}. \quad (26)$$

Con la discretización del dominio (25) y (26) proponemos un esquema de diferencias finitas para las ecuaciones (19), (20), (23), (24). En efecto, cuando tenemos los valores de $w(t_i; z_j)$, $\varrho(t_i; z_j)$, $T(t_i; z_j)$ y $\alpha(t_{i-1})$ ($i' = 1, \dots, i-1$, $j = 1, \dots, N_2$), podemos determinar los valores de $\alpha(t_i)$ y $\Sigma(t_i)$ por las ecuaciones

$$\alpha(t_i) = \alpha(t_{i-1}) + \delta_t \frac{R_1 \varrho(t_{i-1}; \bar{z}_1) T(t_{i-1}; \bar{z}_1) - p_{ex}}{\delta_z \sum_{j=1}^{N_2} \varrho(t_{i-1}; z_j) w(t_{i-1}; z_j)}, \quad (27)$$

$$\Sigma(t_i) = \frac{1}{z_1} \delta_t \sum_{i'=1}^{i-1} \varphi(t_i - t_{i'}) \alpha(t_{i'}) \delta_z \times \sum_{j=1}^{N_2} (D_1(i', j) - D_2(i', j)) w(t_{i'}; z_j), \quad (28)$$

$$D_1(i', j) = \frac{\bar{\pi}_{vs}(T(t_{i'}; z_j))}{\rho(t_{i'}; z_{j-1})} (\rho(t_{i'}; z_j) - \rho(t_{i'}; z_{j-1})),$$

$$D_2(i', j) = \frac{d\bar{\pi}_{vs}(T)}{dT} (t_{i'}; z_j) (T(t_{i'}; z_j) - T(t_{i'}; z_{j-1})).$$

Después, cuando tenemos los valores de $\alpha(t_i)$, $\Sigma(t_i)$, $w(t_i; z_{j-1})$, $\rho(t_i; z_{j-1})$, $T(t_i; z_{j-1})$, podemos determinar los valores de $w(t_i; z_j)$, $\rho(t_i; z_j)$, $T(t_i; z_j)$ por las ecuaciones

$$w(t_i; z_{j-1}) \rho(t_i; z_j) + \rho(t_i; z_{j-1}) w(t_i; z_j) = 2w(t_i; z_{j-1}) \rho(t_i; z_{j-1}) - (D_1(i, j) - D_2(i, j)) w(t_i; z_{j-1}), \quad (29)$$

$$\begin{aligned} \rho(t_i; z_{j-1}) c_v T(t_i; z_j) - R_1 T(t_i; z_{j-1}) \rho(t_i; z_j) \\ = \rho(t_i; z_{j-1}) c_v T(t_i; z_{j-1}) - R_1 T(t_i; z_{j-1}) \rho(t_i; z_{j-1}) \\ + \delta_z (R_1 T(t_i; z_{j-1}) + L_{tr}) (D_1(i, j) - D_2(i, j)), \end{aligned} \quad (30)$$

$$\begin{aligned} \alpha(t_i)^2 \rho w(t_i; z_{j-1}) w(t_i; z_j) + R_1 \rho(t_i; z_{j-1}) T(t_i; z_j) \\ + R_1 T(t_i; z_{j-1}) \rho(t_i; z_j) = \alpha(t_i)^2 \rho w(t_i; z_{j-1}) w(t_i; z_{j-1}) \\ + 2R_1 \rho(t_i; z_{j-1}) T(t_i; z_{j-1}) - \delta_z g \rho(t_i; z_{j-1}) - \delta_z g \Sigma(t_i); \end{aligned} \quad (31)$$

en (29) y (30), $D_1(i, j)$ y $D_2(i, j)$ son como en (28) (evidentemente sustituyendo i en lugar de i').

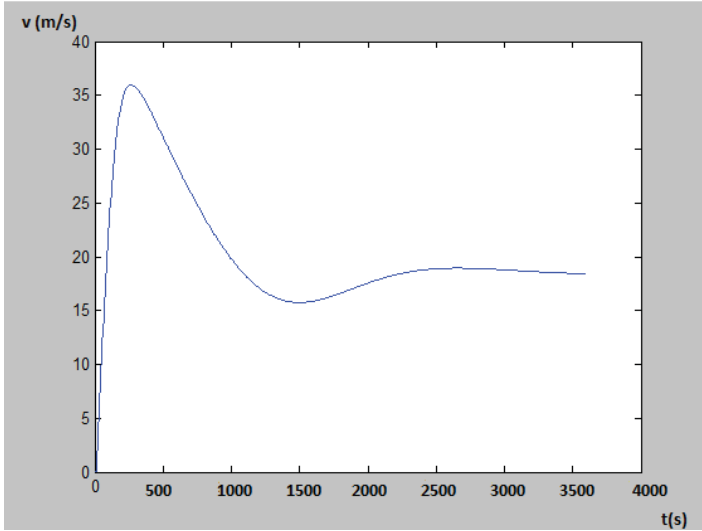


Figura 1. Desarrollo de la velocidad en el punto $z = 0$; la velocidad se indica en el eje vertical con la unidad m/s , mientras el eje horizontal indica el tiempo con la unidad s .

V RESULTADO DEL CÁLCULO

El resultado del cálculo es ilustrado en las figuras. Las Figuras 1-4 conciernen al caso sin viscosidad y sin

conductividad térmica, mientras que la Fig. 5 ilustra el desarrollo de la velocidad en el punto $z = 0$ en el caso en que en el cálculo se tiene en cuenta la viscosidad y la conductividad térmica.

En la Fig. 1 se ve la velocidad máxima alrededor de 4 minutos 10 segundos con el valor de $36 m/s$; después cae hasta alrededor de $16 m/s$ por el efecto de fricción de la precipitación, y más tarde se estabiliza alrededor del valor de $18 m/s$.

En las figuras siguientes, Figs. 2, 3 y 4, se ilustran la distribución vertical de la temperatura T , la de la densidad ρ y de la velocidad $v = \alpha w$ en el momento $t = 3600 s$, es decir, cuando el proceso se convierte en casi estacionario.

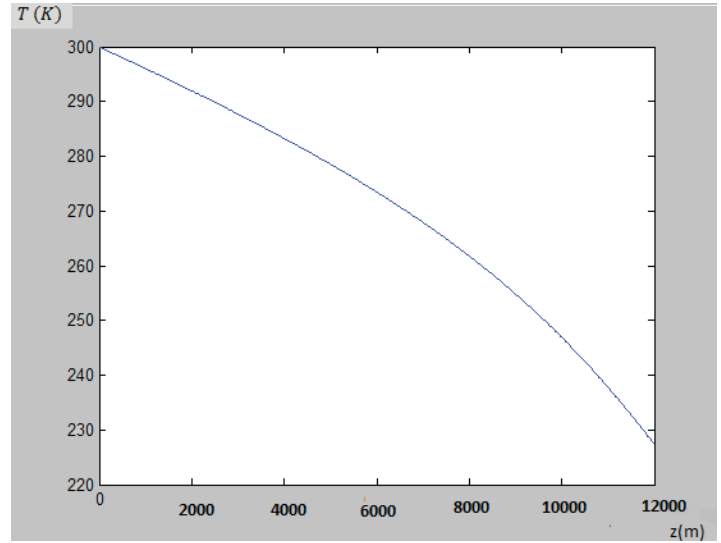


Figura 2. Distribución vertical de la temperatura T en el momento $t = 3600 s$; el eje horizontal indica la altura con la unidad m .

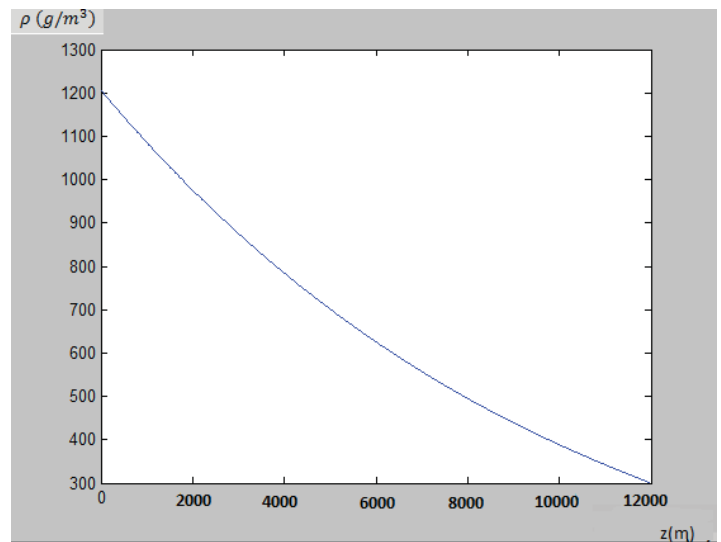


Figura 3. Distribución vertical de la densidad ρ en el momento $t = 3600 s$; el eje horizontal indica la altura con la unidad m .

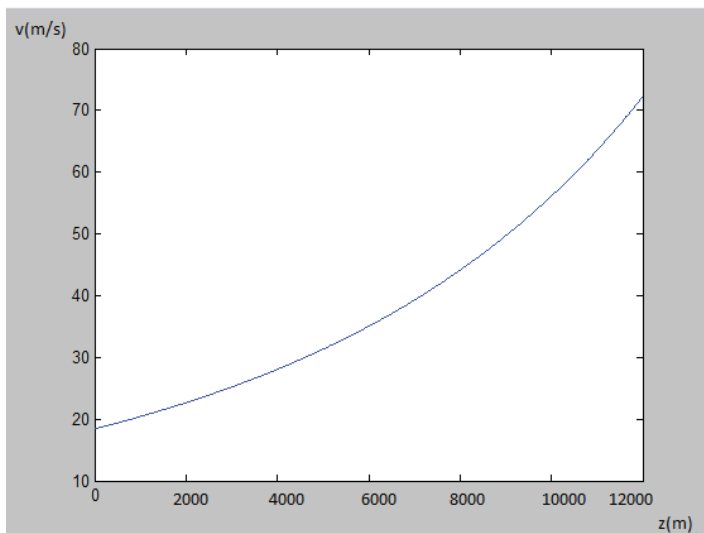


Figura 4. Distribución vertical de la velocidad $v = \alpha w$ en el momento $t = 3600$ s; el eje horizontal indica la altura con la unidad m .

El crecimiento de la velocidad según la altura que se ve en la Fig. 4 es debido a la hipótesis de la constancia de la sección del cilindro: en efecto, la velocidad crece de manera casi inversamente proporcional a la densidad.

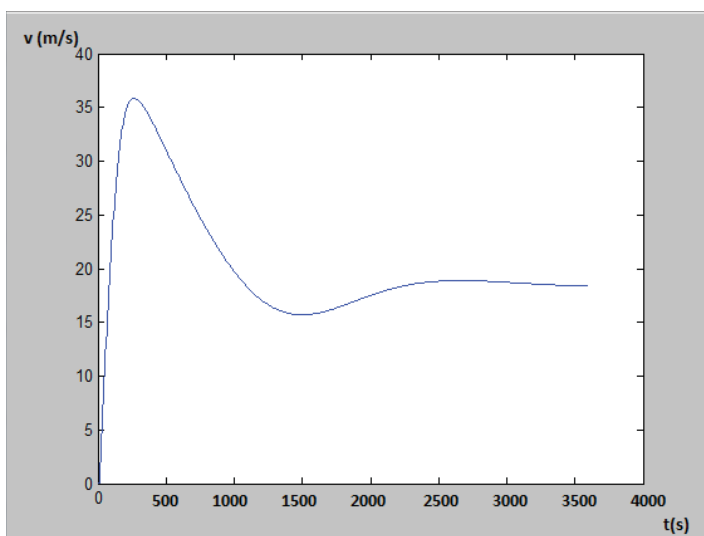


Figura 5. Desarrollo de la velocidad en el punto $z = 0$ por el sistema de ecuaciones con viscosidad y conductividad térmica.

La Fig. 5 se ha obtenido con el coeficiente de viscosidad $\mu = 1,66 \cdot \frac{4}{3} \cdot 10^{-2} \text{ g/s} \cdot \text{m}$ y el de conductividad térmica $\kappa = 2,36 \cdot 10 \text{ g} \cdot \text{m/s}^3 \text{K}$ (por eso el número de Prandtl sería 0,706), que corresponden a los valores relativos al nitrógeno N_2 (véase [8]). Se ve que el resultado para el caso con la viscosidad y la conductividad térmica no es sensiblemente diferente del caso sin viscosidad y sin conductividad térmica. Además, con pruebas de cálculo con otros valores de los coeficientes de viscosidad y de conductividad térmica, hemos constatado también que el resultado es muy estable y no cambia sensiblemente por la elección de otros valores de estos parámetros. Si calculamos el número de Reynolds con la amplitud característica 12 km y con los valores escogidos, él se hace enorme (del orden de $2 \cdot 10^{14}$); pero por la

razón mencionada arriba, en este modelo a mesoescala no consideramos movimientos turbulentos en escala bastante más pequeña.

VI CONCLUSIONES

Aunque la estructura del cilindro vertical de 12 km de altura no sea natural, nos parece que el resultado de la simulación numérica muestra el aspecto fundamental de la evolución del flujo del aire húmedo con la condensación del vapor de la torre caliente: crecimiento rápido de la velocidad vertical del aire y su estabilización relativa por el efecto de fricción de gotitas y de pedazos de hielo. En esta simulación hemos utilizado algunas aproximaciones un poco arbitrarias como la de $\Sigma(t)$. Por eso necesitaremos buscar aproximaciones mejores para estas funciones y hacer otras simulaciones. Además la estabilización relativa del crecimiento de la velocidad vertical en este ejemplo es debida también al efecto del hecho de que la sección del cilindro vertical es constante, y, en general, el fenómeno en la naturaleza tiene una estructura más compleja, lo que modifica el comportamiento de su desarrollo. Por lo tanto, para modelar los fenómenos naturales, será necesario modificar la estructura geométrica del modelo e introducir otros efectos que tenemos que tener en cuenta.

VII AGRADECIMIENTOS

Queremos expresar nuestra gratitud al prof. Oscar Díaz Rodríguez del Instituto de Meteorología de La Habana, Cuba, por las discusiones de gran utilidad que sostuvimos con él relacionadas con nuestra investigación.

- [1] A. P. Khain, *Modelación matemática de los ciclones tropicales*, (Gidrometeoizdat, Leningrad, 1984).
- [2] W. Cotton, G. Bryan, S. van den Heever, *Storm and cloud dynamics*, II ed. (Academic Press, 2011)
- [3] R. A. Anthes, Rev. Geophys. Space Phys. **12**, 495 (1974).
- [4] P. G. Black, E. A. D' Asaro, W. M. Dinnan, J. R. French, P. P. Niiler, T. B. Sanford, E. J. Terrill, E. J. Walsh and J. A. Zhang, Bull. Am. Meteorol. Soc. **88**, 357 (2007).
- [5] K. A. Emanuel, J. Atmos. Sci. **43**, 585 (1986).
- [6] M. Ojeda Figueroa, "Modelo para el cálculo de intensidad potencial de ciclones tropicales. Tesis de licenciatura en Meteorología". InSTEC, La Habana, Cuba, 2011.
- [7] L. L. Landau, and E. M. Lifchitz, *Mécanique des fluides (Physique théorique, tome 6)*, (Mir, Moscou, 1989).
- [8] A. K. Kikoïne, I. K. Kikoïne, *Physique moléculaire*, (Mir, Moscou, 1979).
- [9] L. T. Matveev, *Física de la atmósfera*, (Gidrometeoizdat, Leningrad-S. Peterburg, 2000)
- [10] F. Prodi, A. Battaglia, *Meteorologia - Parte II, Microfisica*, (Grafica Pucci, Roma, 2004)
- [11] P.-X. Sheng, J. -T. Mao, J.-G. Li, A.-C. Zhang, J.-G. Sang, N.-X. Pan, *Física de la atmósfera*, (Publ. Univ. Pekín, Pekín, 2003).

MAGNETIC BEHAVIOR OF THE ALLOY $(\text{CuInTe}_2)_{1-x}(\text{TaTe})_x$ WITH $x = 0.25$

COMPORTAMIENTO MAGNÉTICO DE LA ALEACIÓN $(\text{CuInTe}_2)_{1-x}(\text{TaTe})_x$ CON $x = 0.25$

P. GRIMA-GALLARDO^{a†}, O. IZARRA^a, R. PEÑA^a, M. MUÑOZ^a, S. DURÁN^a, M. QUINTERO^a, E. QUINTERO^a AND H. ROMERO^b

a) Centro de Estudios en Semiconductores (CES), Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Los Andes, 5101 Mérida, Venezuela. peg@ula.ve[†]

b) Laboratorio de Magnetismo. Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Los Andes, 5101 Mérida, Venezuela.

† corresponding author

Recibido 28/10/2014; Aceptado 04/01/2015

The magnetic behavior of the alloy $(\text{CuInTe}_2)_{1-x}(\text{TaTe})_x$ with $x = 0.25$ had been studied using SQUID techniques. Measurements of DC magnetic susceptibility using the ZFC-FC protocol and variation of magnetization as a function of the applied magnetic field and temperature were performed. It was found the presence of magnetic nanoclusters with a mean diameter of 10 nm and a coercitive field of 0.1 KOe at $T = 5$ K.

El comportamiento magnético de la aleación $(\text{CuInTe}_2)_{1-x}(\text{TaTe})_x$ con $x = 0.25$ fue estudiado utilizando la técnica de SQUID. Se midió la susceptibilidad magnética DC utilizando el protocolo ZFC-FC y la variación de la magnetización en función del campo magnético aplicado y la temperatura. Se encontró la formación de nanoclústeres magnéticos con un diámetro promedio de 10 nm y un campo coercitivo de 0.1 KOe a $T = 5$ K.

PACS: Transition metals and alloys, 71.20.Be; Semiconductor compounds, 71.20.Nr; Magnetic semiconductors, 75.50.Pp.

I INTRODUCTION

Chalcopyrite materials had been object of extensive investigation in the last years because of their applications in solar cells [1] and more recently for the discovery of room temperature ferromagnetism [2–21]. However most of the work in alloys of chalcopyrite materials with metal transition (MT) elements had been based on Mn, which has the limitation of a relative narrow solubility [22–28]. For the contrary, we had founded that other MT elements, as Fe [29], Ni [30], V [31], Nb [32] and Ta [33, 34] have a much larger solubility in the chalcopyrite matrix.

In this work we report the magnetic behavior of the alloy $(\text{CuInTe}_2)_{1-x}(\text{TaTe})_x$ with $x = 0.25$.

II EXPERIMENTAL PROCEDURE

The samples were synthesized using the melt and annealing technique as described elsewhere [35]. Stoichiometric quantities of the elements with purity of 99.99% were charged in a synthetic silica glass ampoule, which was previously subject to pyrolysis in order to avoid reaction of the starting materials with silica glass. Then, the ampoule was sealed under vacuum ($\sim 10^{-4}$ Torr) and the fusion process was carried out inside a furnace (vertical position) heated up to 1500 K at a rate of 20 K/h, with a stop of 48 h at 723 K (melting point of Te). The ampoule was shaking using a mechanical system during all the heating process in order to guarantee the complete mixing of all the elements and the formation of binary species at low temperature. Then, the temperature was gradually decreased until 600 K and this temperature was maintaining for 60 days. Finally, the sample was cooled to room temperature by switching off the furnace. For the

X-ray analysis, a small quantity of the sample, cut from the center of the ingot, was ground mechanically in an agate mortar and pestle. The resulting fine powder, sieved to 106 μ , was mounted on a flat zero-background holder covered with a thin layer of petroleum jelly. The X-ray powder diffraction data was collected at ambient temperature (25 °C), in θ/θ reflection mode using a Siemens D5005 diffractometer equipped with an X-ray tube (Cu K_α radiation: $\lambda = 1.54059$ Å; 40 kV, 30 mA) and equipped with a Ge<111> primary monochromator. A fixed aperture and divergence slit of 1 mm, a 1mm monochromator slit, and a 0.1 mm detector slit were used. The specimen was scanned from 10–80° in 2θ , with a step size of 0.02° and counting time of 40 s. Quartz was used as an external standard. The Bruker AXS analytical software was used to establish the positions of the peaks.

Phase transition temperatures were obtained from Differential Thermal Analysis (DTA) measurements using Perkin-Elmer DTA-7 equipment with gold as reference material. The charge was of powdered alloy of approximately 100 mg weight. Values of the transition for the materials were obtained from the peaks on the DTA. Each phase transition temperature value was determined from the base line intercept of the tangent to the leading edge of the peak in the difference signal. Both heating and cooling runs were carried out for each sample, the average rates of these runs being approximately 10 K/min. The error in determining absolute temperatures is of about ± 8 K.

DC magnetic susceptibility and $M(H, T)$ measurements were performed on a Quantum Design SQUID magnetometer, equipped with a superconducting magnet able to produce fields up to 5 T. The samples in the form of powder were compacted with a cotton piece inside the sample holder in order to prevent any

movement. Zero-Field-Cooling and Field Cooling (ZFC-FC) measurements were carried out in the temperature range 2–300 K. The ZFC protocol consists in cooling the sample from high temperature, to the lowest measuring temperature in a zero magnetic field. Then a static magnetic field of 0.5 kOe is applied and magnetization measured during warming up. The FC consists in cooling the sample in a small DC field and measuring the magnetization during cooling without remove the field.

Virgin magnetization curves and hysteresis loops were obtained at 5, 25, 50 and 100 K with an applied magnetic field in the range 0–50 kOe.

III EXPERIMENTAL RESULTS AND DISCUSSION

In figure 1, the DC magnetic susceptibility of the alloy $(\text{CuInTe}_2)_{1-x}(\text{TaTe})_x$ with $x = 0.25$ is displayed.

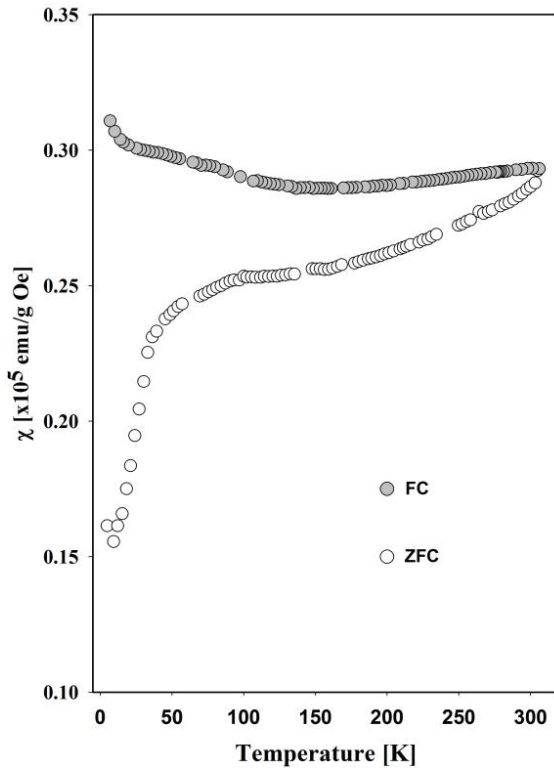


Figure 1. Magnetic susceptibility of the alloy $(\text{CuInTe}_2)_{1-x}(\text{TaTe})_x$ with $x = 0.25$; ZFC: white circles, FC: gray circles.

The furcation of the ZFC and FC curves is an indication of collective freezing of magnetic clusters. The mean magnetic moment of the cluster, μ_c , can be obtained by the expression [36]:

$$\mu_c = \left(\frac{3P_{at}K_B T \chi_m}{N} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (1)$$

where P_{at} is the atomic weight of the magnetic atom, K_B is the Boltzmann constant, χ_m is the mass magnetic susceptibility (in emu/gOe) at the temperature T , and N is the number of magnetic atoms in the experimental mass (0.108 g).

Doing that, we obtain $\mu_c = 5.21 \times 10^3 \mu_B$. This value is typical of ferromagnetic clusters [37]. From crystallographic

information we can also calculate the magnetic moment for unit cell.

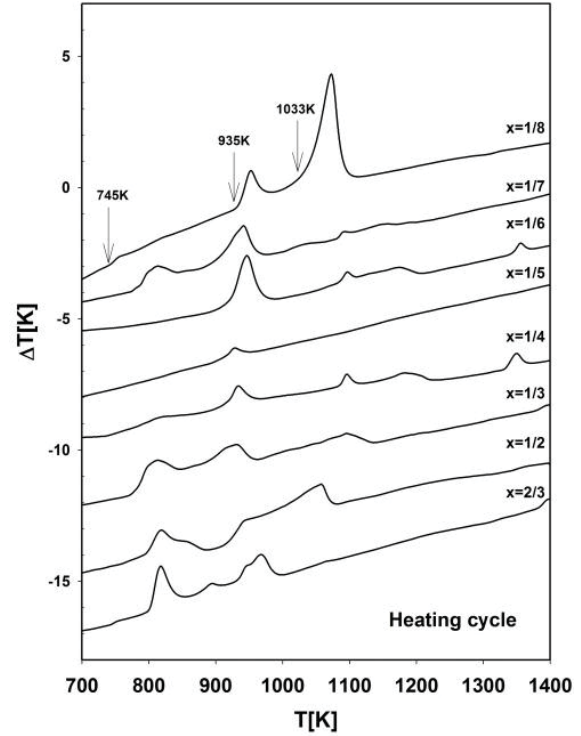


Figure 2. Differential Thermal Analysis (DTA) for $(\text{CuInTe}_2)_{1-x}(\text{TaTe})_x$ alloys. Heating cycle.

Quintero *et al.* have studied in detail the alloys of the type $(\text{I-III-VI}_2)/(\text{Mn-VI})$ [38–40] combining XRD, DTA and optical absorption techniques. They proposed that there are two kinds of ordered chalcopyrite (α and α') and two kinds of disordered sphalerite (β and β') phases. This suggestion has been corroborated by *ab initio* calculations, identifying the phase α with the ordered chalcopyrite, α' with a semi-ordered phase with mixed-symmetry, β' and β with stannite and sphalerite structures, respectively [41]. Existence of the ordered stannite structure for $x = 2/3$ was also suggested for the alloy $\text{CuMn}_2\text{InTe}_4$ [42] and observed experimentally in the $(\text{AgInSe}_2)_{1-x}(\text{HgSe})_x$ alloys [43]. Moreover, detailed XRD measurements and respective Rietveld refinements in CuFeInSe_3 [44], CuFeAlSe_3 , CuFeGaSe_3 [45], CuNiInSe_3 , CuNiGaSe_3 [46], and CuTaInSe_3 [47], indicate that these alloys crystallize in a tetragonal semi-ordered structure, space group $P4_2c$ (N° 112) whereas $\text{CuTa}_2\text{InTe}_4$ [48] and $\text{CuFe}_2\text{InSe}_4$ [49] crystallize in the stannite structure, space group $I4_2m$ (N° 121).

These results suggest that the phase sequence process as a function of composition (x) for $(\text{I-III-VI}_2)_{1-x}(\text{MT-VI})_x$ alloys (MT: Metal Transition) could be $\alpha \rightarrow \alpha' \rightarrow \beta'$, with α' acting as an intermediate phase before a reordering of the cationic sublattice which occurs at $x = 2/3$.

With regards to $(\text{CuInTe}_2)_{1-x}(\text{TaTe})_x$, the solubility of Ta in the CuInTe_2 chalcopyrite matrix is less than $x = 0.125$ as it can be observed in figure 2. Effectively, it is well known that the chalcopyrite phase of CuInTe_2 shows two phase transitions: the melting (1062 K) and order-disorder (945 K) [50]. The

presence of a third peak at 745 K for the composition $x = 1/8$ is evidence of a new crystal structure. For $x = 0.25$, the DTA curve shows, at least, five thermal transitions.

The diffraction pattern of sample $x = 0.25$, showed in Figure 3, is composed by a tetragonal chalcopyrite-like phase and a secondary phase identified as Ta_2Te_3 [51].

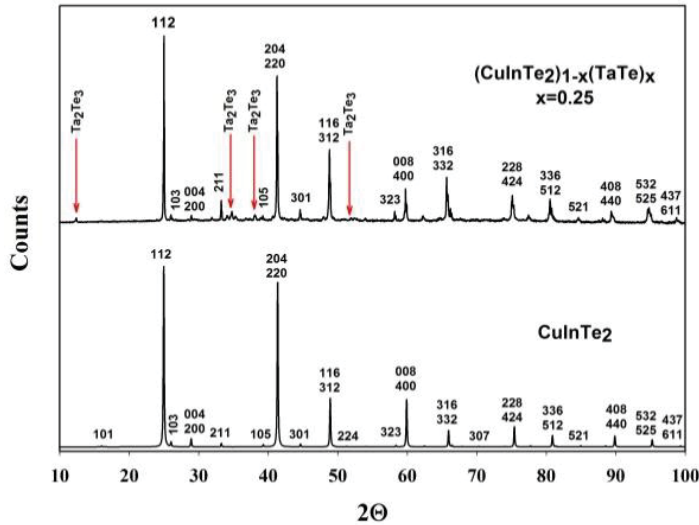


Figure 3. X-ray diffraction patterns of sample $x = 0.25$ (top) and $CuInTe_2$ (bottom). Arrows signal the presence of a secondary phase identified as Ta_2Te_3 .

Based in DTA and x-ray diffraction measurements, and the previous discussion about the crystallographic evolution of $(I-III-VI_2)_{1-x}(MT-VI)_x$ alloys we can conclude: a) the sample $x = 0.25$ is two phases. The mean phase is tetragonal, close to chalcopyrite, but DTA curve excludes the $I42d$ space group; b) the composition value of the sample ($x = 0.25$) is far from the value $x = 2/3$ for which the cationic reordering takes place, so the $I42m$ space group is also excluded; c) discard leads to the conclusion that sample $x = 0.25$ belongs to the $P42c$ space group.

It is worth to note here that there is very little information about the phase Ta_2Te_3 . Apart its crystal structure we are not found any information about its magnetic behavior and, in consequence, we cannot evaluate how this secondary phase can affect the magnetic behavior of the mean phase. However, as Ta_2Te_3 represents less than 5 % in the diffraction pattern, we will assume that it will affect very little.

For the $P42c$ space group, there are 8/7 atoms of Ta^{+2} by unit cell. Using Hund's rules, the magnetic moment of $Ta^{+2} = 3.87 \mu_B$, in consequence, the magnetic moment for unit cell is $(3.87 \mu_B)(8/7) = 4.42 \mu_B/\text{unit cell}$.

The number of unit cells by cluster is given by:

$$N_{uc} = \mu_p / p \mu_{uc} = 1178. \quad (2)$$

The volume of the cluster is then:

$$V_c = N_{uc} V_{uc} = 5.6 \times 10^2, \text{ nm}^2 \quad (3)$$

Where V_{uc} is the volume of the tetragonal unit cell: $a^2 c$ ($a = 6.186 \text{ \AA}$ and $c = 12.428 \text{ \AA}$) [33]. Finally, the mean diameter of

the clusters assuming spherical symmetry is:

$$D_p = \left(\frac{6V_p}{\pi} \right)^{1/3} = 10 \text{ nm}. \quad (4)$$

The hysteresis loops for $T = 5, 25, 50$ and 100 K are showed in Figures 4 to 7. The sequence of measurements was: from $H = 0$ to $+20 \text{ kOe}$ (virgin curve), then from $H = +20 \text{ kOe}$ to -20 kOe and finally from $H = -20 \text{ kOe}$ to $+20 \text{ kOe}$. In the figures, the white circles represent the experimental measurements and the lines a guide for the eyes.

The labels indicate the values of the magnetic saturation (M_s), the remanent magnetization (M_r) and the coercitive field (H_c)

In Table 1, the parameters obtained from the hysteresis curves are summarized.

Table 1. Parameters obtained from the hysteresis loops.

Temperature (K)	Magnetic Saturation ($\times 10^3 \text{ emu/g}$)	Remanent Magnetization ($\times 10^3 \text{ emu/g}$)	Coercitive Field (kOe)
5	6.5	7.5	0.22
25	6.1	8.2	0.17
50	6.2	7.0	0.13
100	6.0	6.0	0.11

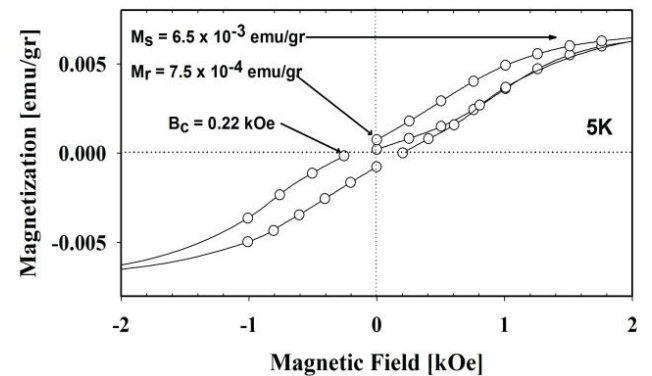
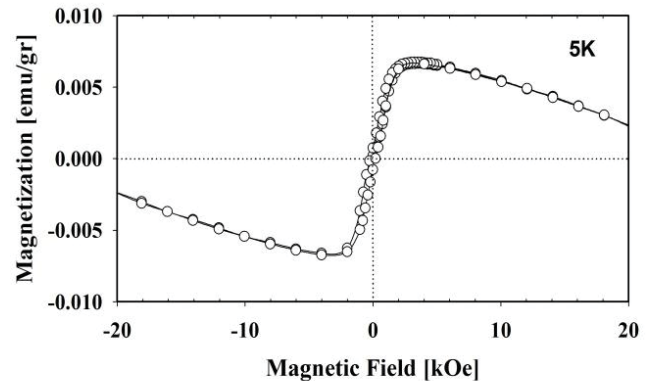


Figure 4. Top: Hysteresis loop of the alloy $(CuInTe_2)_{1-x}(TaTe)_x$ for $x = 0.25$ and $T = 5 \text{ K}$. Bottom: Amplification around $H = 0$ showing the values of M_r , M_s and B_c .

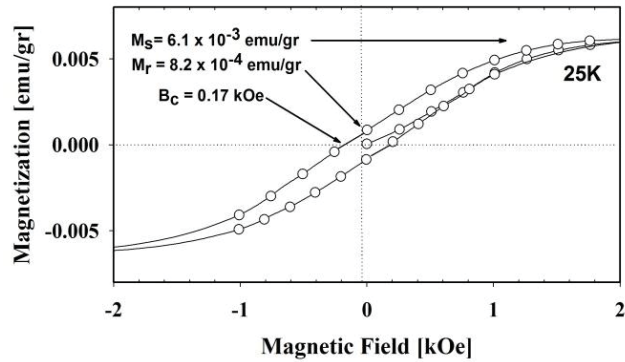
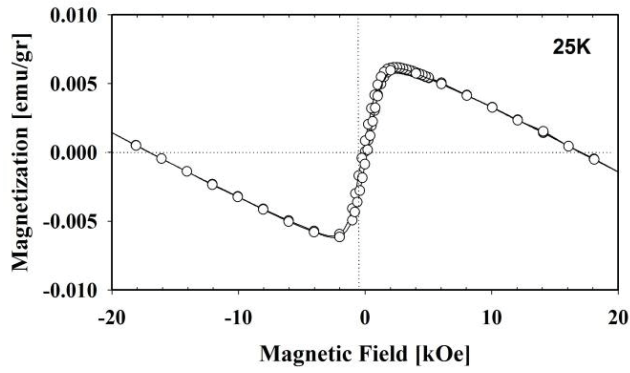


Figure 5. Top: Hysteresis loop of the alloy $(\text{CuInTe}_2)_{1-x}(\text{TaTe})_x$ for $x = 0.25$ and $T = 25$ K. Bottom: Amplification around $H = 0$ showing the values of M_r , M_s and B_c .

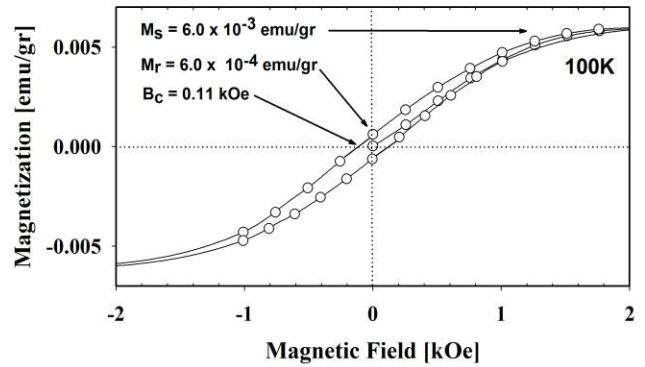
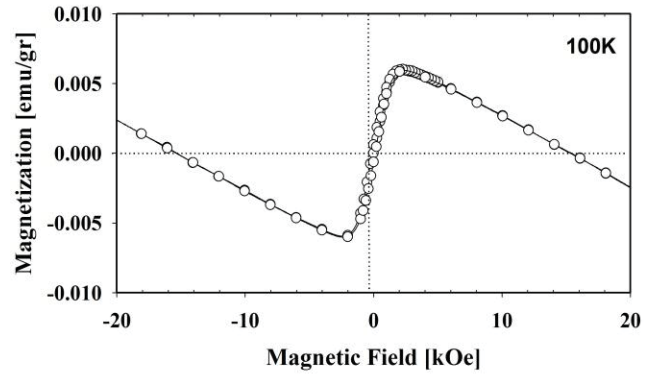


Figure 7. Top: Hysteresis loop of the alloy $(\text{CuInTe}_2)_{1-x}(\text{TaTe})_x$ for $x = 0.25$ and $T = 100$ K. Bottom: Amplification around $H = 0$ showing the values of M_r , M_s and B_c .

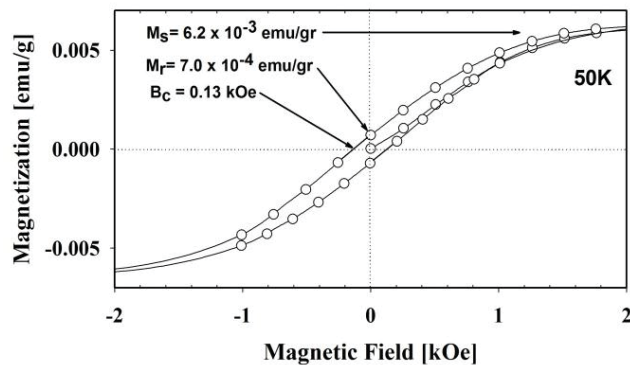
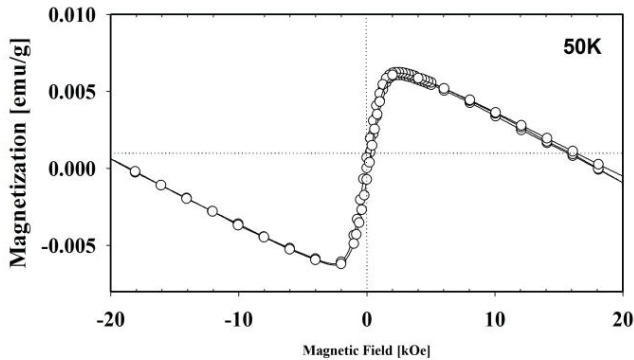


Figure 6. Top: Hysteresis loop of the alloy $(\text{CuInTe}_2)_{1-x}(\text{TaTe})_x$ for $x = 0.25$ and $T = 50$ K. Bottom: Amplification around $H = 0$ showing the values of M_r , M_s and B_c .

Additionally, it clearly observed from the curves at high magnetic fields that a diamagnetic component accompanied the ferromagnetic one. The value of this diamagnetic component can be obtained from the slope of the hysteresis curves, giving: -3.07×10^{-4} ; -4.74×10^{-4} ; -1.30×10^{-4} and -5.17×10^{-4} emu/g for 5, 25, 50 and 100 K, respectively.

The values of the coercive field (symmetric for opposite polarity of magnetic field: $H_c = -H_c$) as a function of temperature is displayed in figure 8. The experimental points had been fitted with the equation:

$$H_c = H_0 \left[1 - \left(\frac{T}{T_B} \right)^n \right]. \quad (5)$$

The fitted parameters given: $H_0 = 0.35$ kOe, $T_B = 564$ K and $n = 0.21$.

According to the classic Mean Field theory for non-interacting and randomly oriented clusters the coefficient " n " must be close to 0.5 [52] whereas we are obtained a much lower value that suggest, for the contrary, a strong interaction between them. This is coherent with the relative flat behavior of the FC curve in the magnetic susceptibility. Moreover, the relation between the remanence and saturation magnetizations, is close to 0.1 which disagrees with the expected value of 0.5 predicted by the Stoner-Wohlfarth model [53]. Another indication that the

magnetic behavior of this alloy is far from an ideal system.

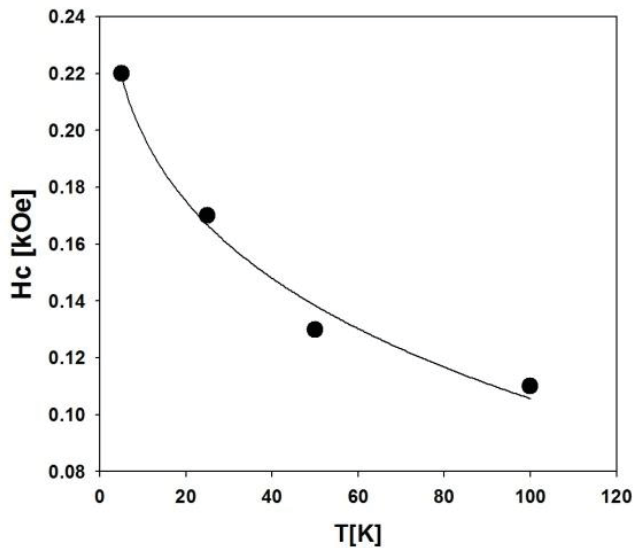


Figure 8. Measured coercive field as a function of temperature: 5, 25, 50 and 100 K for the alloy $(\text{CuInTe}_2)_{1-x}(\text{TaTe})_x$ for $x = 0.25$. Black circles: experimental; line: fit with equation (5).

CONCLUSIONS

The magnetic behavior of the alloy $(\text{CuInTe}_2)_{1-x}(\text{TaTe})_x$ with $x = 0.25$ has been investigated using Squid techniques. The DC magnetic susceptibility shows hysteresis of ZFC and FC curves in the entire range of temperature measurements 82-300 K) which is typical of cluster glass magnetic systems. From the values of the magnetic susceptibility at 300 K the mean magnetic moment and diameter of the clusters have been calculated. Hysteresis loops show that coexist two magnetic components, one ferromagnetic another diamagnetic. From the relation between remanence and saturation magnetizations, the variation of the coercive field with temperature and the flat character of the FC curve it is inferred that this alloy does not follow the Stoner-Wohlfarth model due to strong magnetic interactions between clusters.

IV ACKNOWLEDGMENTS

The authors want to thanks to FONACIT for financial support through the Project PEI 1697 and CDCHTA project C-1885-14-05-B. We also thanks to Dr. Fiorani, Istituto di Chimica dei Materiali, CNR, Monterotondo, Italy for SQUID facilities.

- [1] J. L. Shay and J. H. Wernick. *Ternary Chalcopyrite Semiconductors: Growth, Electronic Properties, and Applications*, (Pergamon Press, Oxford 1974).
- [2] G. A. Medvedkin, T. Ishibashi, T. Nishi, K. Hayata, Y. Hasegawa, K. Sato, Jpn. J. Appl. Phys. **39**, L949 (2000).
- [3] K. Sato, G. A. Medvedkin, T. Ishibashi, T. Nishi, K. Yonemitsu, K. Hirose, J. Magn. Soc. Jpn. **25**, 735 (2001).
- [4] K. Sato, G. A. Medvedkin, K. Hayata, Y. Hasegawa, T. Nishi, T. Ishibashi, J. Magn. Soc. Jpn. **2**, 283 (2001).

- [5] G. A. Medvedkin, T. Ishibashi, T. Nishi, K. Sato, Semiconductors **35**, 305 (2001).
- [6] K. Sato, G. A. Medvedkin, T. Nishi, Y. Hasegawa, V. Misawa, K. Hirose, T. Ishibashi, J. Appl. Phys. **89**, 7027 (2001).
- [7] K. Sato, G. A. Medvedkin, T. Ishibashi, K. Hirose, J. Cryst. Growth **237-239**, 1363 (2002).
- [8] K. Hirose, G. A. Medvedkin, T. Ishibashi, T. Nishi, K. Sato, J. Cryst. Growth **237-239**, 1370 (2002).
- [9] S. Choi, G.-B. Cha, S.C. Hong, S. Cho, Y. Kim, J.B. Ketterson, S.-Y. Jeong and G.-C. Yi, Solid State Comm. **122**, 165 (2002).
- [10] S. Cho, S. Choi, G.-B. Cha, S.C. Hong, Y. Kim, Y.-J. Zhao, A.J. Freeman, J.B. Ketterson, B.J. Kim and B. -C. Choi, Phys. Rev. Lett. **88**, 257203 (2002).
- [11] S. Cho, S. Choi, G.-B. Cha, S.C. Hong, Y. Kim, J.B. Ketterson, B.J. Kim, Y.C. Kim, B. -C. Choi and J. -H. Jeong, J. Korean Phys. Soc. **42**, S724 (2003).
- [12] G. A. Medvedkin, S.I. Goloshchapov, V.G. Voevodin, K. Sato, T. Ishibashi, S. Mitani, K. Takanashi, Y. Ishida, J. Okabayashi, V. Fujimori, D.D. Sarma, T. Kamatani, H. Akai, Int J. Nanosci. **3**, 39 (2004).
- [13] R.V. Demin, L.I. Koroleva, S.F. Marenkin, S. Mikhailov, T. Aminov, H. Szymczak, R. Szymczak and M. Baran, J. Magn. Magn. Mater. **290-291**, 1379 (2005).
- [14] L. I. Koroleva, V. Yu. Pavlov, D. M. Zashchirinskiĭ, S. F. Marenkin, S. A. Varnavskii, R. Szymczak, V. Dobrovolskiĭ and L. Killinskiĭ, Phys. Sol. State (a) **49**, 2121 (2007).
- [15] V.M. Novotortsev, A.V. Kochura and S.F. Marenkin, Inorg. Mater. **46**, 1421 (2010).
- [16] T. Katamani and H. Akai, J. Superconductivity **16**, 95 (2003).
- [17] T. Katamani and H. Akai, Materials Sci. Semicond. Process. **6**, 389 (2003).
- [18] Y.-Jun Zhao and A. Zunger, Phys. Rev. B **69**, 104422 (2004).
- [19] S.Y. Sarkisov and S. Picozzi, J. Phys.: Condens. Matter **19**, 016210 (2007).
- [20] Y.-Jun Zhao and A. Zunger, Phys. Rev. B **69**, 075208 (2004).
- [21] Y.-Jun Zhao, A. J. Freeman, J. Magn. Magn. Mater. **246**, 145 (2002).
- [22] M. Quintero, P. Grima-Gallardo, R. Tovar, R. Goudreaux, D. Bissonette, G. Lamarche and J. C. Woolley, J. Solid State Chemistry. **76**, 210 (1988).
- [23] P. M. Shand, P. A. Polstra, I. Miotkowski and B. C. Crooker, J. Appl. Phys. **75**, 5731 (1994).
- [24] G. Lamarche, J. C. Woolley, R. Tovar, M. Quintero and V. Sagredo, J. Magn. Magn. Mater. **80**, 321 (1989).
- [25] S. Schorr, R. Hoehne, D. Spemann, Th. Doering and B. V. Korzun, Phys. Stat. Sol. (a) **203**, 2783 (2006).
- [26] J. Pérez, P. J. Silva, C. A. Durante-Rincón, J. Primera Ferrer and J. R. Fermín, J. Magn. Magn. Mater. **320**, 2155 (2008).
- [27] R. V. Demin, L. I. Koroleva, S. F. Marenkin, V. M. Novotortsev, B. M. Trukhan, S. A. Varnavskii, T. G. Aminov, G. G. Shabinina, R. Szymczak and

- M. Baran, Proceedings of the 3th Moscow International Symposium on Magnetism, 24-27 (2005).
- [28] L. -J. Lin, N. Tabatabaie, J. H. Wernick, G. W. Hulland B. Meagher, J. Electronic Materials **17**, 321 (1988).
- [29] P. Grima-Gallardo, K. Cardenas, L. Molina, M. Quintero, J. Ruiz, G. E. Delgado and J. M. Briceño, Phys. Stat. Sol. (a) **187**, 395 (2001).
- [30] G. E. Delgado, A. J. Mora, P. Grima-Gallardo, S. Durán, M. Muñoz and M. Quintero, Bull. Mater. Sci., **33**, 637 (2010).
- [31] S. Durán, P. Grima-Gallardo, M. Muñoz, M. Quintero, J. Ruiz, L. Ceballos, J. M. Briceño and H. Romero, Phys. Stat. Sol. (c) **2**, 3766 (2005).
- [32] P. Grima-Gallardo, M. Muñoz-Pinto, S. Durán-Piña, G. E. Delgado, M. Quintero, J. M. Briceño and J. Ruiz, Phys. Stat. Sol. (a) **204**, 1093 (2007).
- [33] P. Grima-Gallardo, S. Durán, M. Muñoz, M. Quintero, G. E. Delgado, J. M. Briceño, H. Romero, V. Briceño, J. Ruiz and J. Fernández, Rev. Mex. Fis. **53**, 256 (2007).
- [34] P. Grima-Gallardo, M. Muñoz-Pinto, S. Durán-Piña, M. Quintero, G. E. Delgado, J. M. Briceño, H. Romero, J. Ruiz and J. Fernández, Rev. Mex. Fis. **53**, 259 (2007).
- [35] G. E. Delgado, A. J. Mora, S. Durán, M. Muñoz, P. Grima-Gallardo, J. Alloys Comp. **439**, 346 (2007).
- [36] B. D. Cullity and C. D. Graham, *Introduction to Magnetic Materials*, Second Edition, (IEEE Press, J. Wiley & Sons N.J. USA, 2009). P. 95.
- [37] O. Petravic, X. Chen, S. Bedanta, W. Kleemann, S. Sahoo, S. Cardoso and P. P. Freitas, J. Magn. Magn. Mater. **300**, 192 (2006).
- [38] M. Quintero, R. Tovar, M. Deshi and J. C. Woolley, Phys. Stat. Sol. (a) **115**, 157 (1989).
- [39] M. Quintero, P. Grima-Gallardo, R. Tovar, G. S. Pérez and J. C. Woolley, Phys. Stat. Sol. (a) **107**, 205 (1988).
- [40] M. Quintero, E. Guerrero, P. Grima-Gallardo and J. C. Woolley, J. Electrochem. Soc., **136**, 1220 (1989).
- [41] K. E. Newman and X. Xiang, Phys Rev. **B44**, 4677 (1991).
- [42] A. Aresti, L. Garbato A. Geddo-Lehman and P. Manca. *Ternary and Multinary Compounds* (Materials Research Society, 1987), p. 497.
- [43] P. Grima-Gallardo and Y. Ng Lee, Phys. Stat. Sol. (a) **134**, K1 (1992).
- [44] J. A. Mora, G. E. Delgado, and P. Grima-Gallardo, Phys. Stat. Sol. (a) **204**, 547 (2007).
- [45] P. Grima-Gallardo, K. Cárdenas, L. Molina, M. Quintero, J. Ruiz, G. Delgado, and J. M. Briceño, Phys. Stat. Sol. (a) **187**, 395 (2001).
- [46] G. E. Delgado, A. J. Mora, P. Grima-Gallardo, S. Durán, M. Muñoz and M. Quintero, Bull. Mater. Sci. **33**, 637 (2010).
- [47] G. E. Delgado, A. J. Mora, P. Grima-Gallardo, S. Durán, M. Muñoz, and M. Quintero, Cryst. Res. Technol. **43**, 783 (2008).
- [48] G. E. Delgado, A. J. Mora, P. Grima-Gallardo, M. Muñoz, S. Duran and M. Quintero, Physica B: Condensed Matter **391**, 385-388 (2007).
- [49] G. E. Delgado, A. J. Mora, P. Grima-Gallardo and M. Quintero, J. Alloys and Compounds **454**, 306 (2008).
- [50] L. S. Palatnik and E. Rogacheva, Sov. Phys. Dokl. **12**, 503 (1966).
- [51] M. Conrad and B. Harbrecht, J. Alloys and Compounds **187**, 181 (1992).
- [52] J. P. Vejpravová, V. Sechovský, D. Nižnanský, J. Plocek, A. Hutlová and J. -L. Rehspringer. WDS'05 Proceedings of Contributed Papers, Part III, 518, 2005.
- [53] E. C. Stoner, E. P. Wohlfarth, Philos. T. R. Soc. A **240**, 599 (1948).

ANALYSIS OF THE THERMAL PROPERTIES OF GaInAs QUANTUM CASCADE LASERS

ANÁLISIS DE LAS PROPIEDADES TÉRMICAS DE LÁSERES DE CASCADA CUÁNTICA DE GaInAs

O. CONCEPCIÓN^a, A. ABELENDA^a, J. C. GONZÁLEZ^b AND M. SÁNCHEZ^{a†}

a) Facultad de Física, Universidad de La Habana, Cuba. maruchy@fisica.uh.cu[†]

b) Dpto. de Física, Universidade Federal de Minas Gerais, Brasil.

[†] corresponding author

Received 16/12/2014; Accepted 18/03/2015

A study of the temperature distribution of GaInAs/AlInAs quantum cascade lasers (QCLs) is presented. The heat conduction equation was solved using a finite-element method and a two-dimensional anisotropic heat-flow model. The thermal resistance (R_{th}) was calculated and compared with experimental results reported by other authors obtaining a good agreement. Comparison of heat dissipation in a double channel (DC) and buried heterostructure (BH) was performed analyzing the influence of the ridge height. The effect of materials used as: heat-sink, capping and insulation layer were evaluated. The results show that a DC-QCL with a deep-ridge waveguide, using: InP as top capping layer, Si_3N_4 as insulation layer, and graphene as heat-sink presents a better performance than a BH-QCL.

Se presenta un estudio de la distribución de temperaturas en láseres de cascada cuántica (QCLs) de GaInAs/AlInAs. La ecuación de conducción del calor se resolvió por el método de los elementos finitos, utilizando un modelo anisotrópico y bidimensional del flujo de calor. Se calculó la resistencia térmica (R_{th}) y se comparó con resultados experimentales reportados por otros autores obteniéndose una buena concordancia. Se realiza una comparación entre las estructuras de doble canal (DC) y enterrada (BH), analizando la influencia de la altura del contacto. Se evaluó el efecto de los materiales usados como: disipador, capa de contacto y aislante. Los resultados muestran que un DC-QCL con un contacto profundo, usando: InP como capa de contacto superior, Si_3N_4 como óxido y grafeno como disipador tiene un mejor rendimiento que un BH-QCL.

PACS: Thermal analysis 81.70.Pg, Semiconductor lasers 42.55.44.10.+i Px, Computer Modeling and simulation 07.05.Tp, Heat conduction

I INTRODUCTION

Quantum cascade lasers are unipolar semiconductor devices based on intraband optical transitions. Unlike conventional interband laser diodes in which the emission wavelength is determined by the energy band gap, in QCLs the laser emission is achieved between quantized states whose energy difference can be engineered to obtain emission at different wavelengths using the same material system. Additionally, in a QCL, once an electron emits a photon, it remains in the conduction band and is injected into an adjacent identical stage in a cascading process allowing the emission of additional photons.

Since its experimental demonstration in 1994 [1], QCLs have experienced a fast development and are now established as viable light sources in the mid infrared (IR). InP based QCLs emitting at $4.9 \mu\text{m}$ with output powers up to Watts in continuous-wave (CW), and very high wall plug efficiencies have been demonstrated [2] in the past years. However, compared with p-n lasers, QCLs exhibit considerably higher threshold currents and voltages, resulting in a more pronounced heating of the active region. Moreover, thermal dissipation in QCLs is very anisotropic being the component of the thermal conductivity in the direction perpendicular to the growth ($k_{\perp}$) much lower than the parallel component ($k_{\parallel}$) due to phonon reflections at the multiple interfaces in the growth direction.

Several processing techniques have been introduced to improve the heat dissipation in QCLs. One is the buried heterostructure [3] in which the active region is buried in a high thermal conductivity semiconductor material, facilitating the heat transfer from the active region in the lateral direction. However, this technique is complicated, time consuming and expensive since it requires an additional re-growth step. Another approach is the double-channel ridge waveguide. In this geometry, the waveguide in the lateral direction is delimited by two etched channels, followed by the deposition of a thick layer of gold to enhance the heat dissipation [4].

Therefore, device optimization focused on the improvement of heat dissipation is essential for obtaining more efficient QCLs, and for this purpose predictive simulation tools are extremely useful.

In this work we present a study of the temperature distribution and heat dissipation in GaInAs/AlInAs QCLs. The 2D heat conduction equation was solved using the finite-element method. With the values of the maximum active region temperature, the thermal resistance R_{th} was calculated and compared with reported experimental data obtaining a very good agreement. The two most used QCL designs were compared in terms of their influence on the increase of the active region temperature (ΔT) and possible optimizations are discussed. The effects of ridge depth and materials used as heat-sink, capping and electrical insulation

layer are investigated.

II DEVICE STRUCTURE AND THERMAL MODELING

The structure considered in the simulation is a double channel ridge waveguide GaInAs/AlInAs QCL emitting at wavelength of 6 μm as reported by Yu *et al.* [4]. The structure is composed of: the active core (injector/active region), waveguide, and cladding and cap layers. Thirty active/injector stages ($\sim 1.53 \mu\text{m}$ thick) were used as the emitting region and sandwiched between two 0.3 μm thick n-Ga_{0.47}In_{0.53}As layers. The layer sequence for one stage is given in barrier/well pairs: (2.9/1.9), (2.6/2.0), (2.3/2.1), (2.2/2.3), (2.1/3.0), (2.1/4.2), (1.3/1.4), (5.0/1.4), (4.4/1.5), (3.9/2.4). The thicknesses are in nanometers. The well and barrier materials used are Ga_{0.36}In_{0.64}As and Al_{0.62}In_{0.38}As, respectively. The upper cladding layer consists of a 2 μm thick n-InP, followed by a 1 μm thick n⁺-Ga_{0.47}In_{0.53}As capping layer. The device was grown onto an InP substrate which acts as a lower waveguide cladding layer. The 450 nm SiO₂ layer is used as isolation material to define the top contact and confine the injected current only to the active region. The ridge is 15 μm width and 5.13 μm deep, and a 5 μm -thick Au layer was electroplated around the laser ridges. Calculations were done for epilayer-side up mounted devices with a total width of 80 μm and 2000 μm of cavity length.

To obtain the temperature profile inside the QCL, the steady state heat flow equation was solved. Due to the device symmetry, the equation reduces to a two-dimensional form:

$$\nabla \cdot [k \nabla T(x, y)] + g(x, y) = 0. \quad (1)$$

Here $g(x, y)$ is the heat generated per unit volume (W/m^3), T is the temperature (K), and k is the thermal conductivity ($\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$).

Eq.(1) was solved using the finite-element method. The boundary conditions considered are the following:

- (i) thermally isolated sidewalls;
- (ii) no heat flow through the upper surface, because of the negligible effect of thermal radiation and thermal diffusion of air particles; considering the laser mounted epilayer-up, the upper surface is the outmost layer grown;
- (iii) due to the high value of the thermal conductivity of the heat-sink and its much larger dimensions than those of the laser, it is assumed to remain at the ambient temperature;
- (iv) the heat flow and the temperature are continuous at the interfaces between the laser layers.

Our heat-flow model takes into account two heat sources, the heat generated in the active region and resistive Joule heating in the rest of the layers. The power density in the active region is given by the equation $Q = V_{th}I_{th}/U$, where V_{th} is the threshold voltage, I_{th} is the threshold current, and

U is the volume of the active core. In order to account for the anisotropy of the thermal conductivity in the active region, the values of the in-plane, $k_{||}$ and cross-plane, $k_{\perp}$ components were taken from Refs. [5–7]. The rest of the layers were considered to be isotropic. Layers composing the injector and active region were considered separately, differing from the common practice to treat the whole active region as being just one material.

The structural parameters and thermal conductivities used in calculation are listed in Table 1. The thermal conductivity of the ternary and quaternary layers was obtained by interpolation from that of the corresponding binaries [8].

Table 1. Thermal conductivities and layer thicknesses of the structure simulated.

Material	Thickness (μm)	Thermal Conductivity (W/mK)
Heat sink/copper	400	398.36
Ti	0.04	21.6
Au	0.12	317.33
n-InP substrate/cladding	89.26	68
n-Ga _{0.47} In _{0.53} As	0.3	4.82
Ga _{0.36} In _{0.64} As/Al _{0.62} In _{0.38} As active region (30 stages)	1.53	$k_{ } = 5.5$ $k_{\perp} = 2.2$
n-InP upper cladding	2	68
cap n ⁺ -Ga _{0.47} In _{0.53} As	1	4.82
SiO ₂	0.45	1.28

III RESULTS AND DISCUSSION

Figure 1 shows the temperature distribution profile in the growth direction for the DC-QCL described, epilayer-up onto a Cu heat-sink held at $T = 300 \text{ K}$.

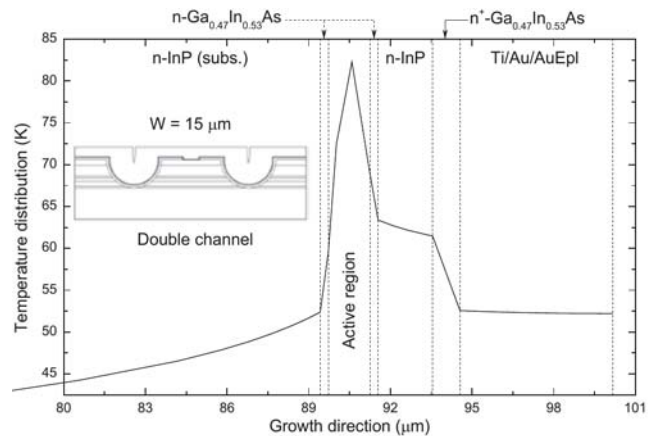


Figure 1. Calculated temperature distribution profile starting from the substrate. The inset schematically shows the cross section of the simulated device.

The operational parameters: threshold current density ($J_{th} = 2.29 \text{ kA}/\text{cm}^2$), threshold voltage ($V_{th} = 9.26 \text{ V}$) and device length ($L = 2 \text{ mm}$) were taken from Ref. [4], corresponding to a power density $Q = 1.3810^{14} \text{ W}/\text{m}^3$.

In the simulation, the heat-sink temperature was kept at 300 K and the device is assumed to be epilayer-up mounted.

It is clear that in the epilayer-down bonding the heat dissipation is considerably improved because the active region is placed closer to the heat-sink. However, this scheme is more complicated due to the risk of a short circuit or contamination of the laser facet with the indium solder, and the epilayer-up mounting is generally preferred.

As can be seen in Figure 1, the maximum temperature is attained at the center of the active region, being $\Delta T = 82.3$ K for a heat-sink temperature of 300 K. This is in very good agreement with the values of 79 K and 83.9 K obtained in Ref. [4] for heat-sink temperatures of 293 K and 308 K respectively. The heat generated in the active core transfers mainly via the InP substrate. Thus, the internal temperature becomes lower at the edges of the active region.

The thermal resistance is a parameter typically used to compare the thermal performance of the devices and can be obtained from the expression:

$$R_{th} = \frac{\Delta T}{J_{th} V_{th} A'} \quad (2)$$

where ΔT is the temperature difference between the active region and the heat sink and A is the area of the active region, that is the product of the ridge width W by the laser length.

According to Eq.(2) and using the value of $\Delta T = 82.3$ K previously obtained, the thermal resistance is 12.9 K/W, which is in close agreement with the value of 13.2 K/W reported for this device at the heat sink temperature of 308 K [4].

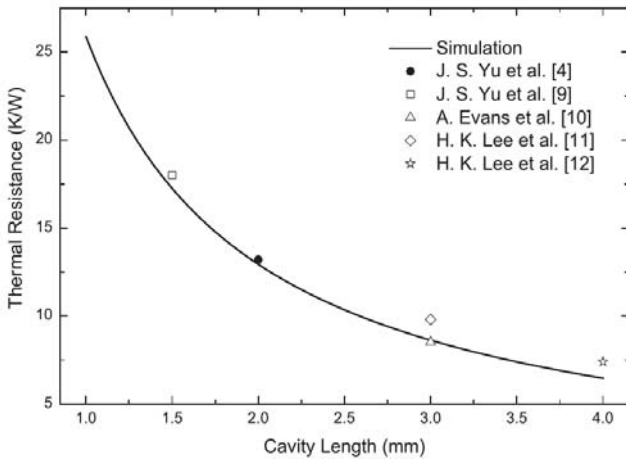


Figure 2. Cavity-length dependence of the thermal resistance for DC-QCLs. The solid line represents our calculation, and the circles, the experimental data reported in Refs. [9, 11, 12, 18].

In Figure 2 the calculated thermal resistance is plotted as a function of the cavity length (solid line). The black circle is the experimental value reported in Ref. [4] for the simulated device. For comparison, measured values reported for other DC-QCLs [9, 11, 12, 18] are also displayed.

As can be seen a very good agreement between our calculation and experimental reported data is obtained. It is important to point out that the solid line represents the R_{th} calculated for the structure modeled, which is not exactly the case of the other devices, thus differences between the model and real values are unavoidable.

To study the impact of the device geometry on the active region temperature, a comparison between a QCL sharing the same active region of the DC structure of Ref. [4], but having a buried waveguide, was done. In the simulation we have assumed that the two QCLs have the same injection current density ($J_{th} = 2.29$ kA/cm²) and are epilayer-up bounded onto a heat-sink. The result obtained for the BH is $\Delta T = 78.2$ K confirming that it is more efficient to remove the heat from the active region compared to the DC structure.

To optimize the DC structure to achieve results similar or better than the BH, the influence of the ridge height was analyzed. This is important since, in fabrication of the top contact, the ridges are etched to different depths, and often authors do not report the value of this important parameter. For instance, in Ref. [13] the ridge was etched down to approximately half of the lower cladding layer in a BH-QCL. In Ref. [14] the ridge was etched until 7 μ m and in Ref. [3] 1 μ m deep into the substrate.

Figure 3 shows the maximum temperature increase obtained in the active region as a function of the ridge height (h). Here h_1 corresponds to an etching depth where only the n⁺-Ga_{0.47}In_{0.53}As capping layer is removed (shallow-ridge waveguide). This procedure was repeated removing layer by layer. Thus h_2 is the case when both the n⁺ capping and the top InP cladding layer are removed. Likewise, h_3 represents the case where all the layers above the active region are removed and h_4 when the whole active region is also eliminated, h_5 is the case in which the lower Ga_{0.47}In_{0.53}As waveguide layer is also removed (deep-ridge waveguide), h_6 is the case in which a layer of 1 μ m thickness from the substrate was removed.

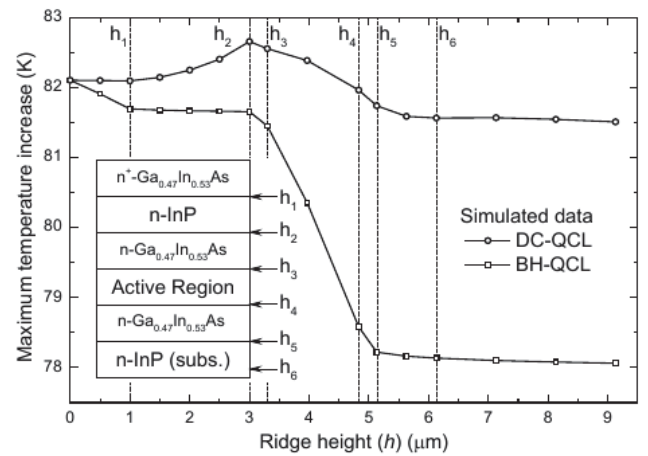


Figure 3. Calculated maximum temperature increase (ΔT) in the active region for the DC and BH QCL as a function of the ridge height (h).

It is clearly seen that the value of h plays an important role on the active region temperature being more pronounced in case of the BH. At first, the temperature rises as the depth is increased, reaches a maximum for a ridge depth h_2 and decreases thereafter. This result can be explained because with the elimination of the 2 μ m InP cladding layer of high thermal conductivity the effective area to remove the heat is reduced. From this point on, a further increase in depth produces a successive decrease of the temperature, until it

reaches the substrate. This is because in this case the layers eliminated ($\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$ and the active region) are very thin and have very low thermal conductivities. However, at the same time the active region is being surrounded by a thick layer of gold with a high thermal conductivity. Once the whole active region is etched out and both sides of the ridge are covered by gold, the lateral heat flux is enhanced.

The effect is more pronounced in the BH structure because in this case, as the etching depth is increased, the active region is getting more and more surrounded by a high thermal conductivity semiconductor material instead of the standard insulator/metal sidewall coverage used in DC structures. However, as mentioned previously, the BH is most complicated and expensive, since it requires an additional growing step.

According to these results, the optimum height, h_6 , is that in which the ridge was etched a little into the substrate ($\sim 1 \mu\text{m}$).

Note that, for depths greater than h_6 the temperature remains almost constant. This is because once both sides of the active region are covered by gold, the heat dissipation cannot be further improved since an additional increase in the etch depth no longer produces a significant increase in the effective area to remove the heat.

The effect of the material used as heat-sink was also evaluated. Copper is the standard heat sink used in almost all laser diode packages, owing to its excellent thermal conductivity, and its good mechanical machining properties. However, materials with even higher thermal conductivities are desired and we compared three different materials: copper ($398.36 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$) [12], diamond ($2000 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$) [15] and graphene ($5000 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$) [16]. Figure 4 shows simulation results for a DC-QCL.

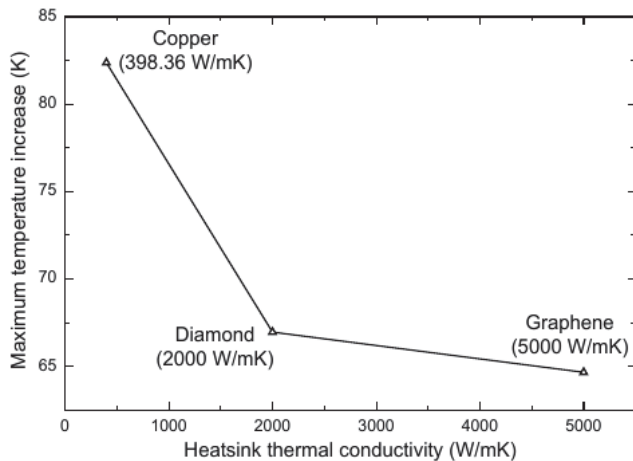


Figure 4. Dependence of maximum temperature on the thermal conductivity of the heat-sink. Results are shown for a DC-QCL epilayer-up mounted.

We included graphene in the comparison since it exhibits an extremely high thermal conductivity, among the highest of any known materials. It is important to note that the conductivity of graphene decreases significantly when it is in contact with a substrate, so there are still many technical challenges before graphene becomes industrially viable,

however, this material holds an enormous potential for thermal management applications in future devices [17,18].

As expected the smallest increase in the temperature is obtained when graphene is used as a heat-sink. Compared with copper, a reduction of 21.4% in the active region temperature of the DC-QCL can be obtained.

Simulations were also done using Si_3N_4 as the insulator layer used to define the upper contact instead of SiO_2 , and substituting the $\text{n}^+\text{-Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$ cap layer for InP. Silicon nitride has higher thermal conductivity ($3.5 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$) than SiO_2 and besides a thermal expansion coefficient (CTE) of $3.3 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ [19], which is closer to the CTE of the semiconductor materials forming the structure. On the other hand, InP has a thermal conductivity about 15 times greater than the ternary GaInAs. Table 2 shows the value of maximum temperature in the device reported in Ref. [4], and the value predicted by the simulation when some parameters are optimized.

Table 2. Optimized parameters obtained from simulation.

Parameters	DC QCL ΔT (K)
SiO_2 as insulator layer. $\text{n}^+\text{-GaInAs}$ copper-heat-sink h_5	82.3
Si_3N_4 as insulator layer. $\text{n}^+\text{-InP}$ graphene-heat-sink h_6	59.5

Results show that, with a ridge height h_6 equivalent to an etching deep of about $1 \mu\text{m}$ inside the substrate, replacing the SiO_2 isolation layer by Si_3N_4 , and the $\text{n}^+\text{-Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$ capping layer by InP, and using graphene as heat-sink, the active region temperature of DC-QCLs can be reduced from 82.3 K to 59.5 K. This value is lower than the one obtained for the original BH, $\Delta T = 78.2 \text{ K}$ proving that with a proper design the DC structure can be a good substitute for a more complex and expensive BH.

It is worthwhile noting to note that the performance of the double channel structure can be further improved by optimizing other parameters like the distance between channels. Moreover, a study of the combined effect of the geometrical parameters could give more insight to get the full optimization of the DC QCL from a thermal standpoint.

CONCLUSIONS

A comparison between the thermal behavior of DC and BH QCL is presented analyzing the influence of the different design parameters and materials on the active region temperature. Results show that with a proper design, the DC structure show better performance than the BH. An optimized ridge structure using: InP as top capping layer, Si_3N_4 combined with a deep-ridge waveguide is found to offer the best performance compared with the BH. To further optimize the QCL structures, the use of graphene as a heat-sink is recommended.

The authors would like to thank for the partial financial support of the Brazilian agency CAPES.

- [1] J. Faist, F. Capasso, D. L. Sivco, C. Sirtori, A. L. Hutchinson and A. Y. Cho, *Science* **264**, 553 (1994).
- [2] Y. Bai, N. Bandyopadhyay, S. Tsao, S. Slivken and M. Razeghi, *Appl. Phys. Lett.* **98**, 181102 (2011).
- [3] M. Beck, J. Faist, C. Gmachl, F. Capasso, D. Sivco, J. Bailargeon and A. Y. Cho, *Proc. SPIE* **3284**, 231 (1998).
- [4] J. S. Yu, S. Slivken, A. Evans, L. Doris and M. Razeghi, *Appl. Phys. Lett.* **83**, 2503 (2003).
- [5] G. M. de Naurois, B. Simozrag, G. Maisons, V. Trinite, F. Alexandre and M. Carras, *Appl. Phys. Lett.* **101**, 041113 (2012).
- [6] K. Pierscinski, D. Pierscinska, M. Iwinska, K. Kosiel, A. Szerling, P. Karbownik and M. Bugajski, *J. Appl. Phys.* **112**, 043112 (2012).
- [7] H. Lee and J. S. Yu, *Solid-State Electronics* **54**, 769 (2010).
- [8] S. Adachi, *J. Appl. Phys.* **102**, 063501 (2007).
- [9] J. S. Yu, A. Evans, J. David, L. Doris, S. Slivken and M. Razeghi, *IEEE* **16**, 747 (2004).
- [10] A. Evans, J. Nguyen, S. Slivken, J. S. Yu, S. R. Darvish and M. Razeghi, *Appl. Phys. Lett.* **88**, 051105 (2006).
- [11] H. K. Lee, K. S. Chung and J. S. Yu, *Appl. Phys. B* **93**, 779 (2008).
- [12] H. K. Lee and J. S. Yu, *Appl. Phys. B* **106**, 619 (2012).
- [13] L. Diehla, D. Bour, S. Corzine, J. Zhu, G. Hfler, M. Lonar, M. Troccoli and F. Capasso, *Appl. Phys. Lett.* **89**, 081101 (2006).
- [14] M. Razeghi, *IEEE J. Quantum Elect* **15**, 941 (2009).
- [15] C. A. Evans, "The optical and thermal properties of quantum cascade laser", Ph.D. thesis, University of Leeds, 2008.
- [16] A. A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, I. Calizo, D. Teweldebrhan, F. Miao and C. Ning Lau, *Nano Lett.* **8**, 902 (2008).
- [17] S. Ghosh, I. Calizo, D. Teweldebrhan, E. P. Pokatilov, D. L. Nika, A. A. Balandin, W. Bao, F. Miao and C. N. Lau, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 151911 (2008).
- [18] N. Han et al., *Nat. Commun.* **4**, 1452 (2013).
- [19] V. V. Mamutin, N. D. Ilyinskaya, D. A. Bedarev, R. V. Levin, and B. V. Pushnyi, *Semiconductors* **48**, 1103 (2014).

ESTADOS CUASI-ESTACIONARIOS DE HUECOS EN UNA HETEROESTRUCTURA SEMICONDUCTORA A CAPAS: TIEMPOS DE VIDA Y AUTOENERGÍAS

QUASI-BOND STATES OF HOLES IN A LAYERED SEMICONDUCTOR HETEROSTRUCTURE: LIFE TIMES AND EIGENENERGIES

M. A. HERNÁNDEZ-BERTRÁN[‡] Y L. DIAGO-CISNEROS[†]

Facultad de Física, Universidad de La Habana, Cuba. mahernandez@estudiantes.fisica.uh.cu[‡] ldiago@fisica.uh.cu[†]

[†] autor para la correspondencia

Recibido 29/01/2015; Aceptado 06/05/2015

Utilizando el hamiltoniano (4×4) de Kohn-Luttinger y el formalismo de la Aproximación Dispersiva Multicomponente (MSA), se determinaron los niveles de energía, las autofunciones correspondientes a los huecos pesados (hh) y los huecos ligeros (lh) en una heteroestructura semiconductora a capas en el régimen desacoplado. El formalismo MSA se ha extendido por primera vez al estudio de los tiempos de vida de los estados cuasi-estacionarios de hh y lh , lo cual en adición, condujo a novedosas relaciones con las autoenergías. Se verifica la formación de las minibandas al incrementarse el número de capas en la heteroestructura, así como el vínculo entre las autoenergías y los picos de resonancia en el coeficiente de transmisión. Se obtuvo la distribución de los tiempos de vida de los estados cuasi-estacionarios que conforman las minibandas, resultando más duraderos aquellos estados cuyas energías estaban más cercanas a las fronteras de las minibandas.

Using the (4×4) Kohn-Luttinger Hamiltonian and the Multicomponent Scattering Approach (MSA), we determined the eigenenergies and the eigenfunctions of heavy holes (hh) and light holes (lh) in a layered semiconductor heterostructure within the uncoupled regime. For the first time the MSA had been extended to study the hh , lh quasi-bond states lifetimes, and as a bonus leading to novel relation with the eigenenergies. As expected, we verified the appearance of the mini-bands as the numbers of layers in the heterostructure increases, and also the relation between the eigenenergies and resonances for the transmission coefficient. Finally, the mini-band lifetimes distribution was obtained, and we found this quantity to be longer for those energies closest to the mini-band edge.

PACS: Scattering theory 03.65.Nk, Tunneling 73.43.Jn, Tunneling phenomena 74.50.+r

I INTRODUCCIÓN

El estudio de los sistemas de baja dimensionalidad es desde hace varias décadas un tópico recurrente en numerosos artículos científicos y sobre todo en los últimos años, debido a las posibilidades que ofrecen los dispositivos semiconductores cuyo funcionamiento se basa en las propiedades de estos sistemas. Un buen número de aplicaciones se pueden encontrar en la literatura [1–4].

Dentro de los sistemas de baja dimensionalidad se encuentran aquellos que son cuasi-bidimensionales (Q2D), en específico las heteroestructuras semiconductoras a capas, las cuales serán el sistema físico elegido en este artículo. Las propiedades de transporte cuántico de huecos en estos sistemas se han tratado frecuentemente utilizando la aproximación $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ junto con la construcción de hamiltonianos efectivos de orden $(N \times N)$, un estudio de estas propiedades se pueden hallar en las Refs. [5, 6]. En el presente trabajo seguiremos esta vía como punto de partida para realizar nuestro análisis, la cual forma parte de la Aproximación Dispersiva Multicomponente (MSA por sus siglas en inglés) y además utilizaremos el hamiltoniano efectivo de Kohn-Luttinger [5] de orden (4×4) .

En el caso que nos ocupa trataremos este sistema multicomponente y multicanal en el régimen desacoplado,

donde las propiedades de transporte cuántico no dependen de la orientación del momento angular total de los huecos ligeros (lh : light holes) y pesados (hh : heavy holes) [5]. Fundamentalmente se le prestó atención a los estados cuasi-estacionarios, en especial a sus tiempos de vida debido a que la velocidad de respuesta de los dispositivos que utilizan el fenómeno de tunelaje para su funcionamiento está limitada por dichos tiempos [2]. Un estudio de las propiedades de los estados cuasi-estacionarios para el caso de electrones en heteroestructuras semiconductoras se puede encontrar en la Ref. [7].

El trabajo presenta la siguiente estructura: en la primera sección se discutirá brevemente el sistema físico en cuestión, en la segunda sección se desarrollarán los elementos esenciales de la MSA, luego se tratarán los aspectos relacionados con los estados cuasi-estacionarios y sus tiempos de vida, por último se realizará un análisis de los resultados obtenidos.

II SISTEMA FÍSICO

En la Figura 1 se muestra un esquema del sistema físico bajo estudio, el mismo respresenta una heteroestructura semiconductora a capas. En ella aparecen los cuatro modos propagantes posibles, dos de huecos pesados

(lh) y dos de huecos ligeros (lh), los cuales son identificados por el valor de la proyección del momento angular total y representan los canales accesibles en el sistema. Además se reflejan las transiciones directas (línea discontinua) y cruzadas (línea continua) en la barrera (Capa A) y los estados cuasi-estacionarios en el pozo (Capa B). Vale aclarar que en esta figura están representados más procesos de los que vamos a tener en cuenta ya que estaremos tratando el caso desacoplado donde las transiciones cruzadas están prohibidas [5].

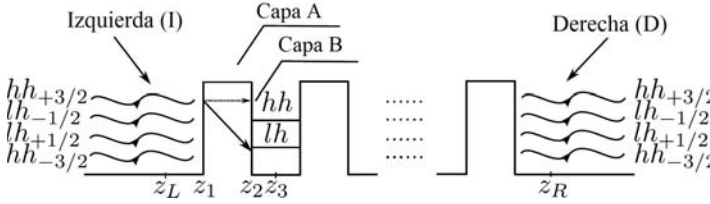


Figura 1. Representación esquemática de la fenomenología del proceso de transporte cuántico de hh y lh a través de una superred de GaAs - electrodo(I)/(AlAs/GaAs)ⁿ/GaAs - electrodo(D).

III FUNDAMENTOS DE LA APROXIMACIÓN DISPERSIVA MULTICOMPONENTE (MSA)

Para comenzar nuestro estudio utilizaremos parte del desarrollo realizado en la Ref. [5], asumiremos un sistema como el que se muestra en la Figura 1, que posee invariancia traslacional en el plano transversal (x, y), y está descrito por la ecuación:

$$\hat{H}(z)F(z) = \epsilon F(z) \quad (1)$$

donde $\hat{H}(z)$ es el hamiltoniano ($N \times N$) dependiente del espín, con invarianza temporal y espacial, ϵ son las autoenergías y $F(z)$ es un vector ($N \times 1$) que representa la función de onda envolvente de los estados de los huecos. En nuestro caso $N = 4$ (hay cuatro canales accesibles en el sistema) y se utilizará el modelo de Kohn-Luttinger, que propone un hamiltoniano que considera estos canales simultáneamente y el cual posee la siguiente forma:

$$\hat{H}_{KL}(z) = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} & 0 \\ H_{12}^* & H_{22} & 0 & -H_{13} \\ H_{13}^* & 0 & H_{22} & H_{12} \\ 0 & -H_{13}^* & H_{12}^* & H_{11} \end{pmatrix} \quad (2)$$

cuyos elementos matriciales están dados por:

$$H_{11} = A_1 \kappa_T^2 + V(z) - B_2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (3)$$

$$H_{12} = \frac{\sqrt{3}\hbar^2}{2m_0} [\gamma_2 (k_y^2 - k_x^2) + 2i\gamma_3 k_x k_y] \quad (4)$$

$$H_{13} = i \frac{\sqrt{3}\hbar^2}{2m_0} \gamma_3 (k_x - ik_y) \frac{\partial}{\partial z} \quad (5)$$

$$H_{22} = A_2 \kappa_T^2 + V(z) - B_1 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (6)$$

cumpliendo también con las siguientes relaciones en la aproximación axial:

$$A_1 = \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 + \gamma_2) \quad (7)$$

$$A_2 = \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 - \gamma_2) \quad (8)$$

$$B_1 = \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 + 2\gamma_2) \quad (9)$$

$$B_2 = \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 - 2\gamma_2) \quad (10)$$

$$\kappa_T^2 = k_x^2 + k_y^2 \quad (11)$$

donde κ_T es el cuasi-momento paralelo a las intercaras o sea paralelo al plano (x, y), los γ_i con $i = 1, 2, 3$; son los parámetros de Luttinger y m_0 es la masa del electrón libre. Utilizando (1) y (2) se obtiene un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas de segundo orden, las cuales se pueden representar por el siguiente sistema matricial:

$$\mathbf{B}(z) \frac{d^2 \mathbf{F}(z)}{dz^2} + \mathbf{C}(z) \frac{d \mathbf{F}(z)}{dz} - \mathbf{K}(z) = \mathbf{0} \quad (12)$$

en el que $\mathbf{B}(z)$, $\mathbf{C}(z)$ y $\mathbf{K}(z)$ son matrices hermíticas en general de dimensión (4×4) compuestas por los elementos presentes en las expresiones (3)-(10) y $\mathbf{0}$ es el vector nulo de dimensión (4×1). Proponiendo una solución de la forma ψe^{iqz} , donde q es un escalar, real o complejo, y ψ es un vector de dimensión (4×1), se llega al siguiente problema cuadrático de autovalores:

$$\{q^2 \mathbf{B} + q \mathbf{C} + \mathbf{K}\} \psi = \mathbf{0} \quad (13)$$

Al resolver (13) utilizando el método propuesto en la Ref. [8] se obtienen los autovalores q_i , que en nuestro caso serán los distintos valores de k_z (componentes de $\mathbf{k}$ en el eje de propagación) y los autovectores ψ_i , se ortonormalizan estos últimos y se escribe la solución general de (1) de la siguiente manera:

$$\mathbf{F}(z) = \sum_{j=1}^{2N} c_j \psi_j e^{iq_j z} \quad (14)$$

La MSA combina los hamiltonianos ($N \times N$) de Kohn-Luttinger con el formalismo de la Matriz de Transferencia (TM) y la Matriz de Dispersión (S), para obtener todas las magnitudes de importancia en los fenómenos de transporte cuántico utilizando las soluciones linealmente independientes del problema (1). Una vez obtenidas las soluciones (14) podemos definir la matriz de transferencia de primer tipo $\mathbf{M}_{fd}(z_L, z_R)$, la cual relaciona las

funciones (14) y sus derivadas en los puntos z_L y z_R de la Figura 1. Esta última definición se puede escribir como:

$$\Psi(z) = \begin{pmatrix} \mathbf{F}(z) \\ \mathbf{F}'(z) \end{pmatrix} \quad (15)$$

$$\Psi(z_R) = \mathbf{M}_{fd}(z_L, z_R) \Psi(z_L) \quad (16)$$

De igual forma se define la matriz de transferencia de segundo tipo:

$$\Phi(z) = \begin{pmatrix} \mathbf{a} \vec{\varphi}(z) \\ \mathbf{b} \overleftarrow{\varphi}(z) \end{pmatrix} \quad (17)$$

$$\Phi(z_R) = \mathbf{M}_{sv}(z_L, z_R) \Phi(z_L) = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \Phi(z_L) \quad (18)$$

En las expresiones anteriores (17)-(18), $\mathbf{a}$ y $\mathbf{b}$ son matrices diagonales de coeficientes, $\vec{\varphi}(z)$ y $\overleftarrow{\varphi}(z)$ son vectores de dimensión $(N \times 1)$ que representan los modos propagantes, $\mathbf{M}_{sv}(z_L, z_R)$ es la matriz de transferencia de segundo tipo o de vectores de estado, que conecta los vectores de estado en la representación de modos propagantes en dos puntos de la heteroestructura y α, β, γ y δ son matrices de orden $(N \times N)$.

Basándonos en las definiciones de (15) y (17) se puede establecer la siguiente relación:

$$\Psi(z) = \mathbf{N} \Phi(z) \quad (19)$$

en la cual la matriz $\mathbf{N}$ depende de las componentes del hamiltoniano. Finalmente empleando las expresiones (17)-(19) se establece una relación entre las matrices de transferencia de primer y segundo tipo:

$$\mathbf{M}_{sv}(z_L, z_R) = \mathbf{N}^{-1} \mathbf{M}_{fd}(z_L, z_R) \mathbf{N} \quad (20)$$

En nuestro caso $\mathbf{N}$ tiene la siguiente forma:

$$\mathbf{N} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ ik_{zl} & 0 & -ik_{zl} & 0 \\ 0 & ik_{zh} & 0 & -ik_{zh} \end{pmatrix} \quad (21)$$

donde k_{zj} será el vector de onda en la dirección de propagación y $j = l, h$ según sean huecos pesados o ligeros.

En los fenómenos de transporte cuántico es de gran utilidad la matriz de dispersión, la cual se define de la siguiente manera:

$$\begin{pmatrix} \overleftarrow{\varphi}(z_L) \\ \overrightarrow{\varphi}(z_R) \end{pmatrix}_{out} = \mathbf{S} \begin{pmatrix} \overrightarrow{\varphi}(z_L) \\ \overleftarrow{\varphi}(z_R) \end{pmatrix}_{in} \quad (22)$$

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{r} & \mathbf{t}' \\ \mathbf{t} & \mathbf{r}' \end{pmatrix} \quad (23)$$

Para la cual $\mathbf{r}$ y $\mathbf{t}$ ($\mathbf{r}'$ y $\mathbf{t}'$) son matrices de orden $(N \times N)$ cuyas componentes están relacionadas con las amplitudes de transmisión y reflexión de las partículas incidentes por la izquierda (derecha), respectivamente. Por último estableceremos las relaciones entre los elementos de la matriz de dispersión con los elementos de la matriz de transferencia de segundo tipo:

$$\mathbf{r} = -\delta^{-1} \gamma \quad (24)$$

$$\mathbf{t} = \alpha - \beta \delta^{-1} \gamma \quad (25)$$

$$\mathbf{t}' = \delta^{-1} \quad (26)$$

$$\mathbf{r}' = \beta \delta^{-1} \quad (27)$$

La relación entre el coeficiente de transmisión del canal j al canal i para el caso de incidencia de partículas por la izquierda y las componentes de las matrices anteriores es la siguiente:

$$T_{ij} = |t_{ij}|^2 \quad (28)$$

En este trabajo sólo hemos considerado los casos donde $i = j$ ya que en el régimen desacoplado los procesos de transiciones cruzadas están prohibidos. Para ver las consecuencias del acoplamiento entre hh y lh se puede recurrir a la literatura [5].

IV ESTADOS CUASI-ESTACIONARIOS Y SUS TIEMPOS DE VIDA. APLICACIÓN DE LA MSA PARA EL RÉGIMEN DESACOPLADO

Estados cuasi-estacionarios y sus tiempos de vida

Para entender físicamente los estados cuasi-estacionarios, introduzcamos la heteroestructura de la Figura 1 en un pozo de potencial cuya profundidad sea mayor que la altura de las barreras de la heteroestructura, esto es, a la izquierda de z_L y a la derecha de z_R el potencial será mayor que el de las barreras (que denotaremos por V_b), esto coincide con el caso de un sistema cerrado, entonces, los estados serán localizados. Si para un tiempo t hacemos cero ese potencial, el sistema pasa a ser abierto, lógicamente desaparecerán esos estados localizados y la partícula podrá escaparse a cualquier región del eje z , pero esto no ocurre instantáneamente sino en un tiempo finito (tiempo de vida del estado cuasi-estacionario). Si ese tiempo es suficientemente grande el estado será casi estacionario y su energía estará aproximadamente bien definida y por lo tanto deberá ser aproximadamente igual a la del estado estacionario [9].

Autoenergías y tiempos de vida en el régimen desacoplado

Para determinar las autoenergías y los tiempos de vida de los estados de huecos, utilizaremos parte de la teoría (MSA) expuesta al principio. En el régimen desacoplado, esto es cuando $\kappa_T = 0$, tenemos que el hamiltoniano de (2) es diagonal y por tanto (12) será un sistema de ecuaciones diferenciales desacopladas. Además las ecuaciones diferenciales que satisfacen las funciones de onda de los lh serán iguales para las dos proyecciones del momento

angular total lo mismo ocurre para el caso de los hh , por lo que a cada uno de estos dos modos le corresponderán los mismos autovalores. Teniendo en cuenta estas consideraciones se resolvieron las ecuaciones diferenciales para una región de potencial constante y se construyeron los vectores que aparecen en (15), sólo que en este caso sus dimensiones son de (2×1) a saber:

$$\Psi_{h,l}(z) = \begin{pmatrix} \phi_{h,l}(z) \\ \phi'_{h,l}(z) \end{pmatrix} \quad (29)$$

En la expresión (29) el subíndice h se refiere a los huecos pesados y el subíndice l a los huecos ligeros. Con las funciones de onda para una región de potencial constante se construye la matriz de transferencia para esa región, para conectar dos regiones consecutivas bastará multiplicar las matrices de transferencia correspondientes a cada región, garantizando que se cumpla la continuidad de la función de onda y su derivada, esto se logra multiplicando por una matriz C cuya forma se encuentra en la Ref. [10]. Para ilustrar lo dicho anteriormente tomemos nuestra celda elemental como la región $z_L < z < z_3$, luego la matriz de transferencia que conecta a los puntos z_L y z_3 , donde se tomaron los subíndices para abreviar la expresión, es:

$$\mathbf{M}_{fd}(L, 3) = \mathbf{M}_{fd}(L, 1)\mathbf{C}_1\mathbf{M}_{fd}(1, 2)\mathbf{C}_2\mathbf{M}_{fd}(2, 3) \quad (30)$$

Luego multiplicando consecutivamente matrices con la forma de (30) se pueden relacionar dos puntos cualesquiera del espacio.

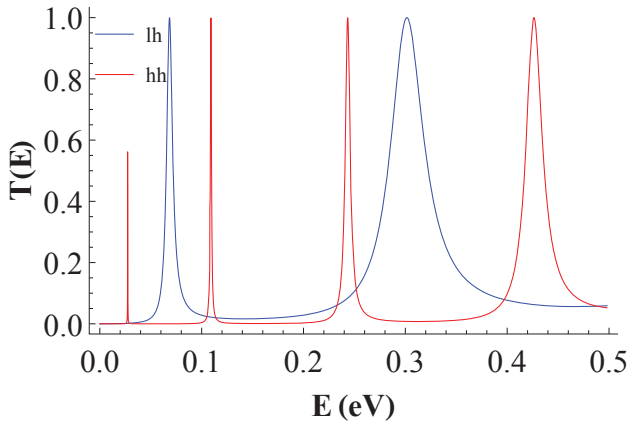


Figura 2. Coeficiente de transmisión para la doble barrera de los hh y lh

Para determinar las autoenergías de los estados cuasi-estacionarios se impone la condición de emisión (en el instante en que el sistema pasa de ser cerrado a abierto desaparecen los modos propagantes que entran al sistema) la cual se obtiene utilizando (17) y (18). Estas serán solución de la siguiente ecuación trascendente donde $i = 1, 2$; según se traten de los estados de hh o lh :

$$\delta_{ii} = 0 \quad (31)$$

Vale aclarar que en (31) nos referimos a los elementos matriciales de δ presentes en (18).

Las soluciones de (31) serán complejas con la forma $E = E_0 - i\frac{\Gamma}{2}$ con E_0 y Γ reales, la primera es la energía del estado cuasi-estacionario y la segunda es la indeterminación del mismo de forma tal que el tiempo de vida medio, el cual satisface una relación de incertidumbre con el ancho del nivel de energía, se puede escribir como:

$$\tau_l = \frac{\hbar}{\Gamma} \quad (32)$$

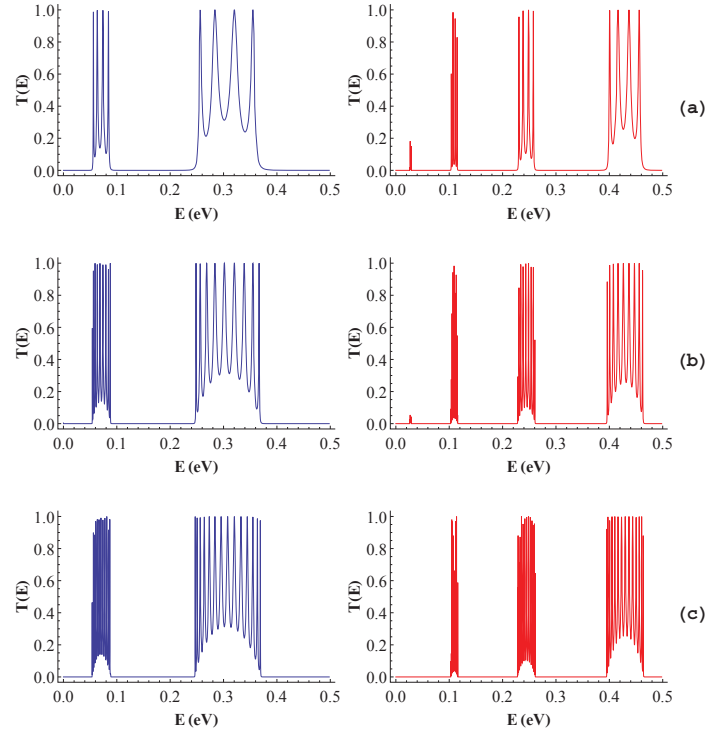


Figura 3. Formación de la estructura de mini-bandas que presentan los niveles de energía dentro de los pozos de la heteroestructura al incrementarse el número de celdas n : a) $n = 5$, b) $n = 10$, c) $n = 15$; para el caso de lh (color azul) y hh (color rojo)

V ANÁLISIS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS

Una vez concluido con los fundamentos teóricos presentaremos a continuación los resultados numéricos, se empleó el modelo físico representado en la Figura 1, con los parámetros que se muestran en la Tabla 1.

Tabla 1. Valores de los parámetros asociados a la Figura 1

	barreras (AlAs)	pozos (GaAs)
Ancho (Å)	10	50
Potencial (eV)	0.498	0
γ_1	3.45	0.68
γ_2	6.85	2.1

En la Figura 2 se muestra el coeficiente de transmisión de hh y lh en el régimen desacoplado para el caso en que el número de celdas es $n = 2$, se puede apreciar como ocurren picos en la transmisión para ciertos valores de energía que se encuentran por debajo de la energía potencial de las barreras, los cuales se corresponden con los valores de las energías de los estados

cuasi-estacionarios [5]. Además el ancho de estos picos está relacionado con los tiempos de vida de dichos estados (mientras más estrecho es el nivel de energía mejor definida la misma lo que se traduce en un mayor tiempo de vida), por lo que podemos decir que los estados cuasi-estacionarios de los hh son más duraderos que los correspondientes a los lh , resultado que está en correspondencia con la mayor masa efectiva de estos.

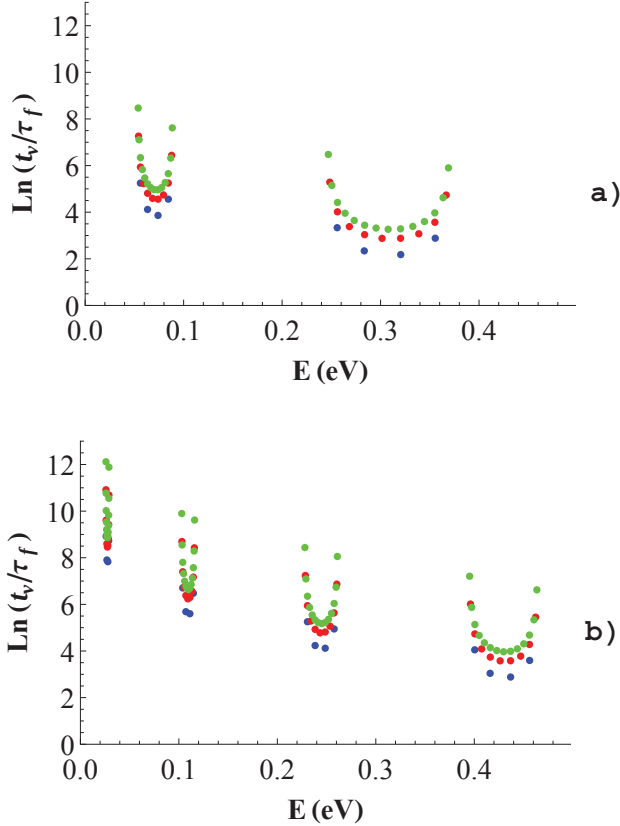


Figura 4. Tiempos de vida en función del número de celdas a) lh y b) hh . azul ($n=5$), rojo ($n=10$), verde ($n=15$), $\tau_f = 0.01ps$

Al incrementar el número de celdas los niveles de energía de los estados cuasi-estacionarios se van desdoblando como se puede apreciar en la Figura 3 formando la estructura de minibandas, surgiendo esta a consecuencia de la coherencia de fase de los estados cuasi-estacionarios y la periodicidad de la heteroestructura [5].

En la Figura 4 se muestran los tiempos de vida de los estados cuasi-estacionarios reescalados a una constante de tiempo característica τ_f del orden del tiempo de recorrido libre de los huecos para una celda, el cual se define de la siguiente forma:

$$\tau_f = \frac{nl_c m_h^*}{\hbar k_z} \quad (33)$$

donde n es el número de celdas, l_c es su longitud y m_h^* es la masa efectiva de los huecos. Además se tomó logaritmo natural de esta relación con el objetivo de poder visualizar todos los tiempos de vida de los estados cuasi-estacionarios en todas las minibandas que se forman (los tiempos de vida de los estados de menor energía eran mucho mayores que los correspondientes a estados de mayor energía).

Se observa que a medida que crece el número de celdas lo hacen también los tiempos de vida de los estados en cada una de las minibandas, esto se debe a que las minibandas tienen un ancho finito, ocupando entonces una región determinada dentro de los pozos de la heteroestructura, cuando se incrementa el número de celdas n los niveles permitidos de energía, que están localizados dentro de las minibandas, se van desdoblando incrementando su cantidad total, luego debido a que la minibanda tiene un ancho constante estos niveles de energía que se van acumulando dentro de ellas tienen que estar cada vez mejor definidos (su ancho es menor), luego podemos afirmar que las cuasi-partículas (huecos) están más ligadas al sistema a medida que n crece. Además se revela cómo es la distribución de los tiempos de vida para los estados cuasi-estacionarios en una minibanda, a saber: los estados que se encuentran en la frontera de la minibanda son más duraderos que los que se encuentran en el centro de la misma. Este último resultado se puede explicar observando el comportamiento del coeficiente de transmisión en las minibandas, el cual indica que las barreras son más transparentes para los estados que se encuentran en el centro de las minibandas.

VI CONCLUSIONES

El modelo MSA es flexible a ser empleado, para el estudio de la fenomenología de los tiempos de vida de estados cuasi-estacionarios de hh y lh . El incremento del número de celdas en una heteroestructura modifica el espectro energético produciendo un desdoblamiento de los niveles cuasi-estacionarios del sistema, en concordancia con lo que ya se conoce, incrementando en consecuencia el tiempo de vida de estos estados. Se pudo comprobar que los niveles cuasi-estacionarios del sistema se encuentran unívocamente determinados por los picos en el coeficiente de transmisión. También se encontró cómo se estructuran los tiempos de vida dentro de una minibanda, siendo favorecidos en cuanto a duración los estados con energías más próximas a la frontera de la misma, resultado novedoso que vincula los tiempos de vida de los estados cuasi-estacionarios con la posición que ocupan sus energías dentro de la minibanda en cuestión.

- [1] L. Esaki, *Physics and Applications of Quantum Wells and Superlattices*, 1ra Ed. (Plenum Press, New York, 1988), pp. 377-473.
- [2] P. Bhattacharya, *Properties of III-V Quantum Wells and Superlattices*, 1ra Ed. (INSPEC, London, 1996), pp. 333-388.
- [3] M. P. Lumb, I. Vurgaftman, C. A. Affouda, J. R. Meyer, E. H. Aifer, R. J. Walters, SPIE Proceedings (Invited Paper), San Diego, California, USA, 2012.
- [4] Z. M. Wang (editor), *Lecture Notes in Nanoscale Science and Technology (Volume 13)*, Quantum Dot Devices, (Springer Science and Business Media, New York, 2012).
- [5] L. Diago-Cisneros, H. Rodríguez-Coppola, R. Pérez-Álvarez, P. Pereyra, Phys. Rev. B **74**, 045308 (2006).

- [6] S. Arias, "Estudio del tiempo de fase y eventos anómalos del transporte cuántico de huecos", Tesis de Licenciatura, Facultad de Física, Universidad de La Habana, 2009.
- [7] F. Nutku, J. Comput. Electron. **13**, 456 (2014).
- [8] F. Tisseur, K. Meerbergen, SIAM Rev. **43**, 235 (2001).
- [9] M. de Dios, *Mecánica Cuántica*, 1ra Ed. (Félix Varela, La Habana, 2006), pp. 111-113.
- [10] L. Diago-Cisneros, "Tunelaje multicanal y simetría de los huecos en heteroestructuras semiconductoras", Tesis de Doctorado, Facultad de Física, Universidad de La Habana, 2005.

FAST COMPUTATION OF HYDRODYNAMIC GREEN'S FUNCTION

CÁLCULO RÁPIDO DE LA FUNCIÓN DE GREEN HIDRODINÁMICA

MOHAMED M. S. NASSER[†]

Department of Mathematics, Faculty of Science, King Khalid University, P. O. Box 9004, Abha 61413, Saudi Arabia. mmnasser@kku.edu.sa[†]
[†] corresponding author

Received 19/12/2014; Accepted 06/06/2015

A fast and accurate numerical method for computing the hydrodynamic Green's function will be presented. The method is based on writing the hydrodynamic Green's function in terms of an auxiliary analytic function which is computed by solving a boundary integral equation with the generalized Neumann kernel. Application of the presented method to compute the stream function of fluid motion due to a finite number of point vortices in an incompressible fluid on planar multiply connected domains of high connectivity with complicated boundaries will be presented.

Será presentado un método rápido y preciso para calcular la función de Green hidrodinámica. El método se basa en escribir la función de Green hidrodinámica en términos de una función analítica auxiliar, que es calculada resolviendo una ecuación integral con condiciones de frontera usando el kernel de Neumann generalizado. Se montará una aplicación del presente método para calcular la función de flujo para el movimiento del fluido debido a un número finito de vórtices puntiformes en un fluido incompresible, sobre dominios planos múltiplemente conexos de alta conectividad, con fronteras complicadas.

PACS: Vortex dynamics, 47.32.C-; Potential theory, 02.30.Em; Integral equations, 02.30.Rz.

I INTRODUCTION

Suppose that R is a multiply connected domain in the extended complex plane $\mathbb{C} \cup \{\infty\}$. The domain R can be bounded of connectivity $m+1$ or unbounded of connectivity m . For bounded R , the boundary $\Gamma = \partial R$ consists of $m+1$ closed smooth Jordan curves $\Gamma_0, \Gamma_1, \dots, \Gamma_m$ where the curve Γ_0 enclose the other curves $\Gamma_1, \dots, \Gamma_m$ (see Figure 1). For unbounded R , $\Gamma = \partial R$ consists of m closed smooth Jordan curves $\Gamma_1, \dots, \Gamma_m$ and $\infty \in G$ (see Figure 2). The orientation of Γ is such that R is always on the left of Γ .

Lin [1, 2] in 1941 considered a special Green function for multiply connected domains in the complex plane which was named by Flucher & Gustafsson [3] as the *hydrodynamic Green's function* (see also [3–5]). Since then, the hydrodynamic Green's function plays a key role in solving several fluid dynamic problems in multiply connected domains in the complex plane (see e.g., [3–7]).

The hydrodynamic Green's function $G(x, y; x_0, y_0)$ with respect to the two points (x, y) and (x_0, y_0) in the domain R is defined as in the following definition from [1] (see also [3–5]). In this paper, for simplicity, we shall write $G(z; z_0)$ instead of $G(x, y; x_0, y_0)$ where $z = x + iy$ and $z_0 = x_0 + iy_0$.

Definition 1 The hydrodynamic Green's function $G(z; z_0)$ is defined with respect to two points $z = x + iy$ and $z_0 = x_0 + iy_0$ in the domain R by the following three conditions.

1. The function

$$g(z; z_0) = -G(z; z_0) - \frac{1}{2\pi} \log |z - z_0| \quad (1)$$

is harmonic with respect to (x, y) throughout the domain R including at the point (x_0, y_0) .

2. If $\frac{\partial G}{\partial n}$ denotes the normal derivative of G on a curve (with $z = x + iy$ as a variable) and ds denotes an element of arc, then

$$G(z; z_0) = c_k \text{ over } \Gamma_k, \quad k = 1, 2, \dots, m, \quad (2a)$$

$$\int_{\Gamma_k} \frac{\partial G}{\partial n} ds = 0, \quad k = 1, 2, \dots, m, \quad (2b)$$

where $c_1, c_2, \dots, c_m$ are real constants.

3. (a) If G is bounded, then

$$G(z; z_0) = 0 \text{ over } \Gamma_0. \quad (3a)$$

(b) If R is unbounded, then over a very large circle of radius

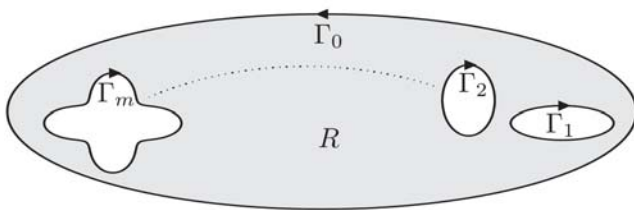


Figure 1. A bounded multiply connected domain R of connectivity $m+1$.

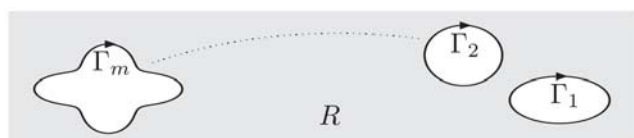


Figure 2. An unbounded multiply connected domain R of connectivity m .

r_0 , the function G behaves as follows

$$G(z; z_0) = -\frac{1}{2\pi} \log r_0 + O\left(\frac{1}{r_0}\right), \quad (3b)$$

$$\frac{\partial G}{\partial s} = O\left(\frac{1}{r_0^2}\right), \quad (3c)$$

$$\frac{\partial G}{\partial \mathbf{n}} = -\frac{1}{2\pi r_0} + O\left(\frac{1}{r_0^2}\right), \quad (3d)$$

where $\frac{\partial G}{\partial s}$ is the tangential derivative along the circle.

Theorem 1 (Lin [1]) *The function $G(z; z_0)$ defined by the conditions in Definition 1 exists uniquely and satisfies the reciprocity property*

$$G(z; z_0) = G(z_0; z). \quad (4)$$

An explicit representation of the hydrodynamic Green's function $G(z; z_0)$ for multiply connected circular domains has been given in [4, 6, 8, 9]. This explicit representation is described in terms of the Schottky-Klein prime function associated with circular domains [10]. If the conformal mapping from the general multiply connected domain R onto a circular domain is known, then the method presented in [4, 6] can be used to calculate the hydrodynamic Green's function in the domain R . However, computing the conformal mapping from the general multiply connected domain R onto a circular domain is not easy. In fact, it is more difficult than computing the hydrodynamic Green's function in the original domain R (see e.g., [11–13]). A boundary integral method for computing the function $G(z; z_0)$ for the coastline multiply connected domain has been presented in [7]. The method is based on computing the conformal mapping from the original coastline domain onto the unit disk with circular slits. The hydrodynamic Green's function in the domain R is then computed from the conformal mapping.

This paper presents a new numerical method for computing the hydrodynamic Green's function $G(z; z_0)$ for general bounded or unbounded multiply connected domains R . The method is based on using a boundary integral equation with the generalized Neumann kernel to compute $G(z; z_0)$ in the domain R without using conformal mappings. The presented method has the ability to compute the hydrodynamic Green's function for domains with high connectivity, domains with complex geometry, domains with close-to-touching boundaries, and domains with piecewise smooth boundaries. As an application, we use the presented method to compute the stream function of fluid motion due to a finite number of point vortices in an incompressible fluid on planar multiply connected domains including a real-world problem domain.

In the method presented in [7], both the kernel and the right-hand side of the integral equation depends on z_0 . While, in the method presented in this paper, only the right-hand side of the integral equation depends on z_0 . This is a very important advantage of the presented method. For

example, to compute the hydrodynamic Green's function $G(z; z_i)$ for l points $z_i, i = 1, 2, \dots, l$, using the method presented in [7], we have to solve l different integral equations. However, for the presented method, we need to solve only one integral equation but with l different right-hand sides. If a proper method for solving linear systems with multiple right-hand sides is used to solve the discretized linear system of the integral equation (see e.g., [14]), then the computational cost of the presented method will be much less than the computational cost of the method presented in [7].

Another important Green's function is the classical Green's function which is defined differently from the hydrodynamic Green's function. Crowdy & Marshall [8] called the hydrodynamic Green's function as the modified Green's function and the classical Green's function as the first-type Green's function (see also [9]). For a numerical method based on the integral equation with the generalized Neumann kernel for computing the classical Green's function on doubly connected domains, we refer the reader to [15, 16].

II THE GENERALIZED NEUMANN KERNEL

In this section, we review the definition of the generalized Neumann kernel on multiply connected domains. For more details on the generalized Neumann kernel, we refer the reader to [17–23].

The curve Γ_j is parameterized by a 2π -periodic complex-valued function $\eta_j(t)$ with $t \in J_j = [0, 2\pi]$. The total parameter domain J is the disjoint union of the intervals J_0 (for bounded R), $J_1, \dots, J_m$. We define a parameterization of the whole boundary Γ as the complex function $\eta(t)$ defined on J by

$$\eta(t) = \begin{cases} \eta_0(t), & t \in J_0 \text{ (for bounded } R), \\ \eta_1(t), & t \in J_1, \\ \vdots \\ \eta_m(t), & t \in J_m. \end{cases} \quad (5)$$

Any real-valued or complex-valued function $\phi(\eta)$ defined on the boundary Γ can be interpreted via $\hat{\phi}(t) := \phi(\eta(t))$ as a 2π -periodic function of the parameter t on J , and vice versa. So, in this paper, we shall not distinguish between $\phi(t)$ and $\phi(\eta(t))$. If $h(t)$ is a piecewise constant function defined on J by

$$h(t) = h_j \quad \text{for } t \in J_j$$

where h_j is a real constant for $j = 0$ (for bounded R), $1, 2, \dots, m$, then for simplicity, the function $h(t)$ will be written as $h = (h_0, h_1, h_2, \dots, h_m)$ for bounded R and $h = (h_1, h_2, \dots, h_m)$ for unbounded R .

We define a complex-valued function A on Γ by

$$A(t) = \begin{cases} \eta(t) - \alpha, & \text{for bounded } R, \\ 1, & \text{for unbounded } R. \end{cases} \quad (6)$$

The generalized Neumann kernel formed with A and η is defined by [17, 18]

$$N(s, t) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left(\frac{A(s)}{A(t)} \frac{\eta'(t)}{\eta(t) - \eta(s)} \right). \quad (7)$$

We define also a kernel

$$M(s, t) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \left(\frac{A(s)}{A(t)} \frac{\eta'(t)}{\eta(t) - \eta(s)} \right). \quad (8)$$

To ensure the continuity of the generalized Neumann kernel, we assume that the boundary Γ is a C^2 smooth curve, i.e., we assume that $\eta''(t)$ is continuous and $\eta'(t) \neq 0$ on J . However, as explained in [19, 22], the method presented in this paper can be used even for domains with piecewise smooth boundaries.

Lemma 1 ([18]) (a) The kernel N is continuous with

$$N(t, t) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{2} \operatorname{Im} \frac{\eta''(t)}{\eta'(t)} - \operatorname{Im} \frac{A'(t)}{A(t)} \right). \quad (9)$$

(b) When $s, t \in J_j$ are in the same parameter interval J_j , then

$$M(s, t) = -\frac{1}{2\pi} \cot \frac{s-t}{2} + M_1(s, t) \quad (10)$$

with a continuous kernel M_1 which takes on the diagonal the values

$$M_1(t, t) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{2} \operatorname{Re} \frac{\eta''(t)}{\eta'(t)} - \operatorname{Re} \frac{A'(t)}{A(t)} \right). \quad (11)$$

Thus, the integral operator

$$\mathbf{N}\mu(s) = \int_J N(s, t)\mu(t)dt \quad (12)$$

is a Fredholm integral operator and the operator

$$\mathbf{M}\mu(s) = \int_J M(s, t)\mu(t)dt \quad (13)$$

is a singular integral operator.

Theorem 2 ([24]) If λ is an eigenvalue of $\mathbf{N}$, then $\lambda \in [-1, 1)$.

III AN INTEGRAL EQUATION FOR THE HYDRODYNAMIC GREEN'S FUNCTION

This section presents a boundary integral equation for computing the hydrodynamic Green's function $G(z; z_0)$ for bounded and unbounded multiply connected domains R . The kernel of the integral equation is the generalized Neumann kernel discussed in the previous section and the right-hand side of the integral equation depends on the point z_0 . By solving the integral equation, we obtain the boundary values of an axillary analytic function f . The values $f(z)$

for interior points $z \in R$ can be computed by the Cauchy integral formula. By obtaining the values of the axillary function $f(z)$, we obtain the values of the hydrodynamic Green's function $G(z; z_0)$. The numerical implementation of the integral equation will be given in the forthcoming sections.

Suppose that a point z_0 is fixed in R and the function γ is defined by

$$\gamma(t) = \frac{1}{2\pi} \log |\eta(t) - z_0|. \quad (14)$$

Then, we have the following theorem from [20, 21].

Theorem 3 For the function γ given by (14), there exists a unique piecewise constant function $h = (h_0, h_1, h_2, \dots, h_m)$ and a unique 2π -periodic Hölder continuous function μ such that

$$A(t)f(\eta(t)) = \gamma(t) + h(t) + i\mu(t), \quad t \in J, \quad (15)$$

are boundary values of an analytic function f in R with $f(\infty) = 0$ for unbounded R . The function μ is the unique solution of the integral equation

$$(\mathbf{I} - \mathbf{N})\mu = -\mathbf{M}\gamma \quad (16)$$

and the piecewise constant function h is given by

$$h = [\mathbf{M}\mu - (\mathbf{I} - \mathbf{N})\gamma]/2. \quad (17)$$

It is clear that the function γ depends on z_0 , then so are the functions h and μ . Hence the function $f(z)$ depends also on z_0 . One can write $f(z; z_0)$ to emphasize the dependence of the function f on z_0 . However, for simplicity of notation, we write $f(z)$ instead of $f(z; z_0)$.

III.1 Bounded R

The function

$$(z - \alpha)f(z) - h_0$$

is analytic in R and its boundary values on Γ satisfies

$$(\eta(t) - \alpha)f(\eta(t)) - h_0 = \gamma(t) + \hat{h}(t) + i\mu(t), \quad t \in J, \quad (18)$$

where $\hat{h}(t) = (0, h_1 - h_0, \dots, h_m - h_0)$. Hence, the function

$$-\operatorname{Re}[(z - \alpha)f(z)] + h_0$$

satisfies the assumptions on the function $g(z; z_0)$ in Definition 1, i.e.,

$$g(z; z_0) = -\operatorname{Re}[(z - \alpha)f(z)] + h_0. \quad (19)$$

Then the hydrodynamic Green's function $G(z; z_0)$ is given by

$$G(z; z_0) = \operatorname{Re}[(z - \alpha)f(z)] - h_0 - \frac{1}{2\pi} \log |z - z_0|. \quad (20)$$

It is clear that, the function $G(z; z_0)$ defined by (20) for bounded R satisfies the conditions of Definition 1.

III.2 Unbounded R

The function $f(z)$ is analytic in R with $f(\infty) = 0$ and its boundary values on Γ satisfies

$$f(\eta(t)) = \gamma(t) + h(t) + i\mu(t), \quad t \in J, \quad (21)$$

where $h(t) = (h_1, \dots, h_m)$. Thus, the function

$$g(z; z_0) = -\text{Re}[f(z)] \quad (22)$$

satisfies the assumptions on the function $g(z; z_0)$ in Definition 1. Hence the hydrodynamic Green's function $G(z; z_0)$ is given by

$$G(z; z_0) = \text{Re}[f(z)] - \frac{1}{2\pi} \log |z - z_0|, \quad (23)$$

which satisfies the conditions of Definition 1.

IV POINT VORTICES

We consider the problem of computing the stream function of fluid motion due to l point vortices in the multiply connected domain R . We have the following theorem from Lin [1] (see also [4]).

Theorem 4 (Lin [1]) *If l vortices of strengths κ_j ($j = 1, 2, \dots, l$) are present in an incompressible fluid at the points z_j ($j = 1, 2, \dots, l$) in the above domain R , the stream function of fluid motion is given by*

$$\psi(z; z_1, z_2, \dots, z_l) = \psi_0(z) + \sum_{j=1}^l \kappa_j G(z; z_j) \quad (24)$$

where G is the hydrodynamic Green's function and $\psi_0(z)$ is the stream function of the motion due to outside agencies, independent of z_j and κ_j .

In this paper, we shall consider only the stream function of fluid motion due to the l point vortices in the absence of motion due to outside agencies, i.e. we shall assume that $\psi_0(z) = 0$. The stream function of fluid motion is then given by

$$\psi(z; z_1, z_2, \dots, z_l) = \sum_{j=1}^l \kappa_j G(z; z_j). \quad (25)$$

V NUMERICAL IMPLEMENTATION

The boundary integral equation (16) can be solved accurately by the Nyström method with the trapezoidal rule [25, 26] (see [20–23] for more details). For $j = 0$ (for bounded R), $1, 2, \dots, m$, each interval J_j is discretized by n equidistant nodes. Hence, the total number of nodes in the total parameter domain J is $(m+1)n$ for bounded R and mn for unbounded R . For domains with piecewise smooth boundaries, singularity subtraction [27] and the trapezoidal

rule with a graded mesh [28] are used. By discretizing the integral equation (16) by the Nyström method with the trapezoidal rule, we obtain $(m+1)n \times (m+1)n$ linear system for bounded R and $mn \times mn$ linear system for unbounded R . These linear systems are solved by the generalized minimal residual (GMRES) method [29]. Each iteration of the GMRES method requires a matrix-vector product which can be computed using the Fast Multipole Method (FMM) in $O(mn)$ operations [30, 31].

By Theorem 2, the eigenvalues of the operator $\mathbf{N}$ are real in the interval $[-1, 1)$. Since $\mathbf{N}$ is compact, the only possible accumulation point of the eigenvalues is 0 [26, p. 40]. Thus, the eigenvalues of the operator $\mathbf{I} - \mathbf{N}$ are real in the interval $(0, 2]$ with 1 as the only possible accumulation point of these eigenvalues. Hence, for sufficiently large n , the eigenvalues of the matrix of the discretized linear system are real in the interval $(0, 2]$ and clustered around 1 (see [23] for more details). Clustering the eigenvalues of the matrix of the linear system around 1 often results in rapid convergence of the GMRES method. Usually, it will need few iterations for convergence. No preconditioning procedure is required.

In the numerical examples below, the MATLAB function FBIE in [22] will be used to obtain approximations to the unique solution μ of the integral equation (16) and the function h in (17), respectively. In the function FBIE, the discretized linear system is solved using the MATLAB function gmres where the matrix-vector product is computed using the MATLAB function zfm2dpart in the MATLAB toolbox FMMLIB2D developed by Greengard and Gimbutas [30]. In the MATLAB function FBIE we choose the parameters iprec=5 (i.e., the tolerance of the FMM is 0.5×10^{-15}), restart=10 (i.e., the GMRES method is restarted every 10 inner iterations), gmrestol= 10^{-14} (i.e., the tolerance of the GMRES method is 10^{-14}), maxit=10 (i.e., the maximum number of outer iterations of GMRES method is 10). The MATLAB function FBIE requires $O(mn \log n)$ operations. Hence, the computational cost for solving the integral equation (16) and computing the function h in (17) is $O(mn \log n)$ operations. For more details, we refer the reader to [22, 23, 30].

By obtaining approximations to μ and h , we thus obtain approximations to the boundary values of the function f by

$$f = \frac{\gamma + h + i\mu}{A}.$$

The values of the function f for interior points $z \in R$ can be computed by Cauchy's integral formula. A fast and accurate method to compute the Cauchy integral formula has been given in [22, 23] (see also [32, 33]). The method is based on using the MATLAB function zfm2dpart in [30]. To compute the Cauchy integral formula at p interior points, the method requires $O(p + mn)$ operations [22].

Hence computing the values of the hydrodynamic Green's function at p interior points in R requires $O(mn \log n)$ operations for computing the boundary values of the auxiliary function $f(z)$ and $O(p + mn)$ operations for computing the Cauchy integral formula.

VI NUMERICAL EXAMPLES

We consider three numerical examples to validate the ability of the presented method to handle wide range of multiply connected domains. In the first example, we consider an unbounded multiply connected circular domain R . In the second example, we consider a bounded multiply connected domain R with piecewise smooth boundaries. Finally, we consider in the third examples a real-world unbounded multiply connected domain R with high connectivity and complicated boundaries. In all examples, we consider an even number l of vortices at the points z_j for $j = 1, 2, \dots, l$. Half of these vortices have strengths $+1$ and the other half have strengths -1 . For bounded R , we choose p equidistant points in the domain R . For unbounded R , we choose p equidistant points in a small part of the domain R surrounding the boundary Γ . Then, we compute the values of the hydrodynamic Green's function $G(z; z_j)$ at these p points z for each z_j . The stream function of fluid motion due to the l point vortices in the absence of motion due to outside agencies is then computed from (25). For each example, we plot the streamlines of the stream function and compute the number of GMRES iterations and the total CPU time required for computing the values of $G(z; z_j)$ at the p points z for each z_j .

Example 1 *The domain R is an unbounded multiply connected circular domain of connectivity 103 exterior to 103 circles.*

For this example, the number of nodes in the discretization of each boundary component is $n = 1024$, the total number of nodes is 105472, the number of point vortices is $l = 20$, and the number of equidistant points chosen in the domain R is $p = 880098$. The GMRES method needs around 22 iterations for converges (see Figure 8 (top)). The streamlines of the stream function corresponding to the 20 point vortices are shown in Figure 3.

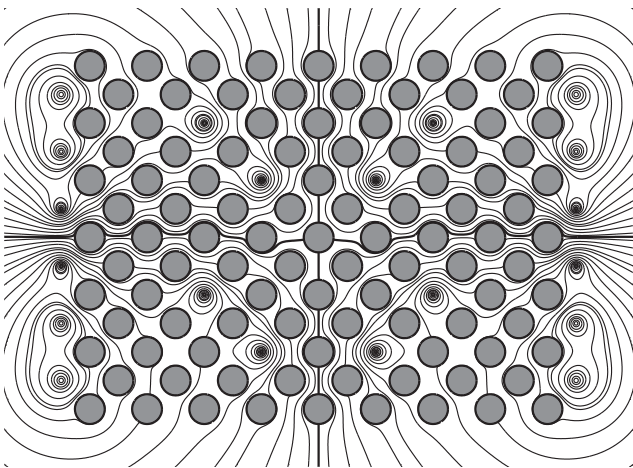


Figure 3. The streamlines for Example 1.

Example 2 *The domain R is a bounded multiply connected domain of connectivity 5 interior to a square and exterior to 4 other squares.*

For this example, the number of nodes in the discretization of each boundary component is $n = 4096$, the total number of nodes is 20480, the number of point vortices is $l = 8$, and the number of equidistant points chosen in the domain R is $p = 906789$. The GMRES method needs around 26 iterations for converges (see Figure 8 (middle)). The streamlines of the stream function corresponding to the 8 point vortices are shown in Figure 4.

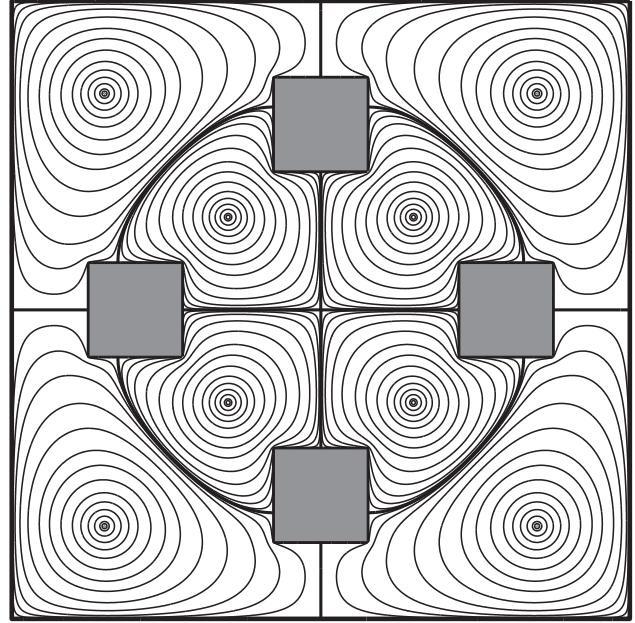


Figure 4. The streamlines for Example 2.

Example 3 *In this example, we consider application of the presented method to a real world problem. We consider the unbounded domain R of connectivity 210 exterior to an artificial archipelago located in the waters of the Arabian Gulf, 4 kilometres off the coast of Dubai, and known as "The World Islands" (see Fig. 8.15 in [22]).*

An aerial image of "The World Islands" is shown in Figure 5. The boundaries of the islands extracted from the aerial image are shown in Figure 6. The boundaries are parameterized by trigonometric interpolating polynomials. It is clear from Figure 6 that the boundaries are very close to each other, but they do not touch each other. For generalized Neumann kernel formed with the function A given by (6), the presented method gives accurate results even for domains with close-to-touching boundaries (see [22]). However, we need to use large values of nodes n . For this example, we use $n = 8192$ so the total number of nodes is 1720320. The number of point vortices is $l = 16$ and the number of equidistant points chosen in the domain R is $p = 854648$. Since the boundaries are very close to each other and have complex geometry, the GMRES method requires more iterations for convergence. It converges after around 90 iterations which is acceptable for such complicated domains

(see Figure 8 (bottom)). The streamlines of the stream function corresponding to 16 vortices are shown in Figure 7.



Figure 5. An aerial photograph of "The World Islands" for Example 3.



Figure 6. The boundaries of the islands extracted from the image of "The World Islands" for Example 3.

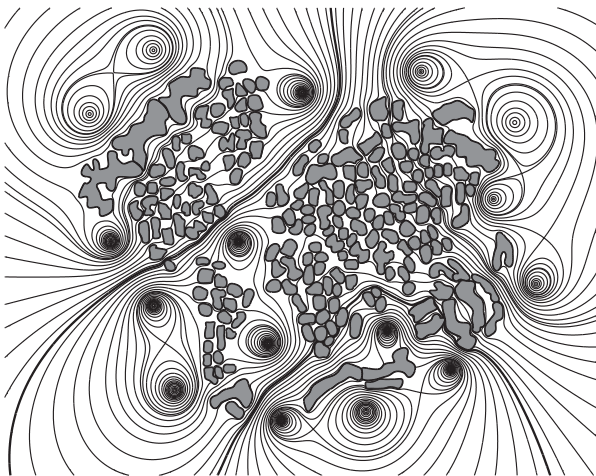


Figure 7. The streamlines for Example 3 obtained with $n = 8192$.

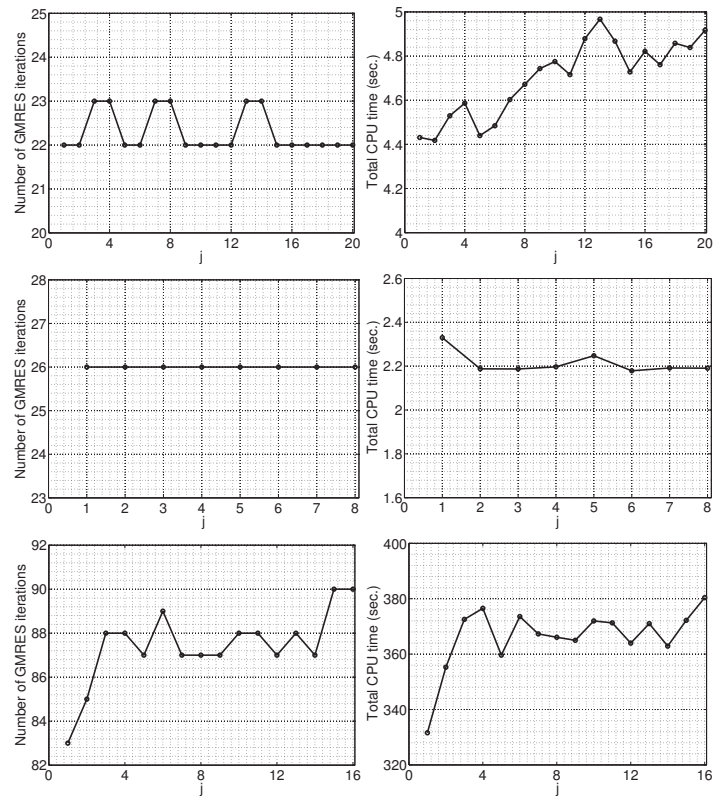


Figure 8. The number of GMRES iterations and the total CPU time required for computing the values of the hydrodynamic Green's function $G(z; z_j)$ at p points z in the domain R for each z_j , $j = 1, 2, \dots, l$, for Example 1 (top), Example 2 (middle), and Example 3 (bottom).

VII CONCLUSIONS

This paper presented a new fast and accurate numerical method for computing the hydrodynamic Green's function in multiply connected domains. The method is based on the boundary integral equations with the generalized Neumann kernel. By solving the integral equation, the hydrodynamic Green's function in the domain R is computed by the Cauchy integral formula. Numerical examples were presented to illustrate that the presented method can be used even for real-world problem domains with complex geometry and high connectivity.

- [1] C. Lin, Proc. Natl. Acad. Sci. **27**, 570 (1941)
- [2] C. Lin, Proc. Natl. Acad. Sci. **27**, 575 (1941)
- [3] M. Flucher and B. Gustafsson, *Vortex motion in two dimensional hydrodynamics*, TRITA-MAT-1997-MA 02, Royal Institute of Technology, Stockholm (1997)
- [4] D. Crowdy and J. Marshall, Proc. R. Soc. A **461**, 2477 (2005)
- [5] M. Flucher, *Variational Problems with Concentration* (Springer, Basel, 1999)
- [6] D. Crowdy, Theor. Comput. Fluid Dyn. **24**, 9 (2010)
- [7] M. M. S. Nasser, T. Sakajo, A. H. M. Murid, and L. Wei, Jpn. J. Ind. Appl. Math. **32**, 205 (2015)

- [8] D. Crowdy and J. Marshall, IMA J. Appl. Math. **72**, 278 (2007)
- [9] D. Crowdy and J. Marshall, Comput. Methods Funct. Theory **6**, 59 (2006)
- [10] D. Crowdy, Nonlinearity **21**, T205 (2008)
- [11] N. Benchama, T. DeLillo, T. Hrycak, and L. Wang, J. Comput. Appl. Math. **209**, 1 (2007)
- [12] M. M. S. Nasser, Comput. Methods Funct. Theory **15**, 187 (2015)
- [13] R. Wegmann, J. Comput. Appl. Math. **130**, 119 (2001)
- [14] P. Martinsson and V. Rokhlin, J. Comput. Phys. **205**, 1 (2005)
- [15] S. Aspon, A. H. M. Murid, and H. Rahmat, AIP Conf. Proc. **1605**, 215 (2014)
- [16] S. Aspon, A. H. M. Murid, M. M. S. Nasser, and H. Rahmat, Jurnal Teknologi **71**, 49 (2014)
- [17] A. H. M. Murid and M. M. S. Nasser, Bull. Malays. Math. Sci. Soc. **26**, 13 (2003)
- [18] R. Wegmann and M. M. S. Nasser, J. Comput. Appl. Math. **214**, 36 (2008)
- [19] M. M. S. Nasser, A. H. M. Murid, and Z. Zamzami, Complex Var. Elliptic Equ. **53**, 989 (2008)
- [20] M. M. S. Nasser, Comput. Methods Funct. Theory **9**, 127 (2009)
- [21] M. M. S. Nasser, SIAM J. Sci. Comput. **31**, 1695 (2009)
- [22] M. M. S. Nasser, Electron. Trans. Numer. Anal. **44**, 189 (2015)
- [23] M. M. S. Nasser and F. Al-Shihri, SIAM J. Sci. Comput. **35**, A1736 (2013)
- [24] M. M. S. Nasser, A. H. M. Murid, M. Ismail, and E. Alejaily, Appl. Math. Comput. **217**, 4710 (2011)
- [25] K. Atkinson, *The Numerical Solution of Integral Equations of the Second Kind* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997)
- [26] R. Kress, *Linear Integral Equations*, 3rd ed. (Springer-Verlag, New York, 2014)
- [27] A. Rathsfield, Math. Methods Appl. Sci. **16**, 443 (1993)
- [28] R. Kress, Numer. Math. **58**, 145 (1990)
- [29] Y. Saad and M. H. Schultz, SIAM J. Sci. Stat. Comput. **7**, 856 (1986)
- [30] L. Greengard and Z. Gimbutas, *FMMLIB2D: A MATLAB toolbox for fast multipole method in two dimensions*, Version 1.2 (2012), <http://www.cims.nyu.edu/cmcl/fmm2dlib/fmm2dlib.html>
- [31] L. Greengard and V. Rokhlin, J. Comput. Phys. **73**, 325 (1987)
- [32] A. Austin, P. Kravanja, and L. Trefethen, SIAM J. Numer. Anal. **52**, 1795 (2014)
- [33] J. Helsing and R. Ojala, J. Comput. Phys. **227**, 2899 (2008)

CAMBIOS DE FASE POR REFLEXIÓN DE LA LUZ EN UN DIELECTRICO

PHASE CHANGES OF LIGHT ON REFLECTION FROM A DIELECTRIC

A. J. BATISTA-LEYVA^{a,b†} Y A. R. BATISTA-TOMÁS^b

a) Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas; abatista@instec.cu[†]

b) Grupo de Sistemas Complejos "Henri Poincaré", Facultad de Física, Universidad de la Habana, La Habana 10400, Cuba

† autor para la correspondencia

Recibido 12/01/2015; Aceptado 16/02/2015

La magnitud del cambio de fase de una onda electromagnética reflejada por la superficie de separación entre dos medios dieléctricos está determinada por las ecuaciones de Fresnel. A pesar de que estas son ciencia establecida y se encuentran en los libros de texto de Óptica y de Física General, su aplicación en varios libros no está libre de errores e imprecisiones. En el artículo se analiza el uso de estas ideas en libros de texto de Física General de frecuente empleo en las universidades cubanas y de otros países, señalando un grupo de problemas presentes en ellos. Este análisis puede servir de guía para los colectivos que imparten las asignaturas que incluyen la Óptica en sus contenidos a nivel de Física General.

Phase changes of an electromagnetic wave when it is reflected from a plane dielectric is determined using the Fresnel relations and the vector diagrams of $\mathbf{E}$ and $\mathbf{H}$. Though these equations are textbook science, their application is troublesome. Here we analyze the use of Fresnel relations to study phase changes by reflection in some of the more often used textbooks of General Physics, both in Cuba and other countries, pointing out some problems present in their analysis. The paper could be useful for professors of Optics and General Physics.

PACS: Education 01.40.-d, Educational Aids, 01.50.-i, General physics (physics education), 01.55.+b

I INTRODUCCIÓN

En un artículo publicado en 1965 Friedmann y Shandu [1] señalaron un grupo de imprecisiones comunes que aparecen en la interpretación de los signos de las relaciones de Fresnel. Estas imprecisiones están provocadas por no utilizar los diagramas vectoriales asociados a la situación que se estudia. En particular en la reflexión, al viajar la luz hacia un medio ópticamente más denso, solo hay inversión de la fase de la onda (para una polarización arbitraria) si el ángulo de incidencia es mayor que el ángulo de Brewster. Para ángulos de incidencia menores solo se encuentra la inversión de la fase en algunos casos particulares de polarización lineal. Los autores señalaban que esto no es explicado claramente en los libros de texto.

Aunque ha pasado un tiempo considerable desde que dicho artículo fue publicado, demostraremos aquí que aún persisten planteamientos erróneos al respecto en libros de texto frecuentemente utilizados. Para lograrlo hemos organizado el artículo de la siguiente forma: primero detallaremos las relaciones de Fresnel y los diagramas de cambio de fase asociados a ellas. A continuación extraeremos el contenido pertinente de dos libros de Física General Universitaria frecuentemente usados en todo el mundo. Por último, con el uso de las relaciones haremos un análisis crítico de lo expuesto en los libros bajo escrutinio.

Consideramos que este artículo puede serle útil a profesores de Óptica a todos los niveles.

II ECUACIONES DE FRESNEL

Es muy fácil demostrar que una onda electromagnética con cualquier estado de polarización, puede representarse como la superposición de dos ondas plano polarizadas (OPP) cuyos vectores eléctricos son:

$$\begin{aligned}\vec{E}_y &= \vec{E}_{0y} \cos(kx - \omega t), \\ \vec{E}_z &= \vec{E}_{0z} \cos(kx - \omega t + \varphi).\end{aligned}\quad (1)$$

Obviamente dicha onda se mueve a lo largo del eje x , las ondas planas tienen como planos de polarización XY y XZ . El valor de φ determina el estado de polarización de la onda resultante. Esta descripción incluye la luz natural (no polarizada) para la cual φ varía rápida y aleatoriamente en el tiempo.

Así, si deseamos determinar el comportamiento de un rayo de luz que se refleja parcialmente en la superficie de separación entre dos medios con diferente índice de refracción, es más fácil descomponer el haz en dos OPP, una de ellas con su vector eléctrico perpendicular al plano de incidencia (conocida como onda s) y otra con su vector eléctrico oscilando en dicho plano (onda p). Los coeficientes de reflexión y transmisión en amplitud se definen como las razones entre las amplitudes de las distintas ondas:

$$r = \frac{E_{0r}}{E_{0i}}, \quad (2a)$$

$$t = \frac{E_{0t}}{E_{0i}}. \quad (2b)$$

Aquí los subíndices i , r , t representan los rayos incidente, reflejado y transmitido (refractado), respectivamente. Las relaciones (o ecuaciones) de Fresnel nos dan el valor de r y t .

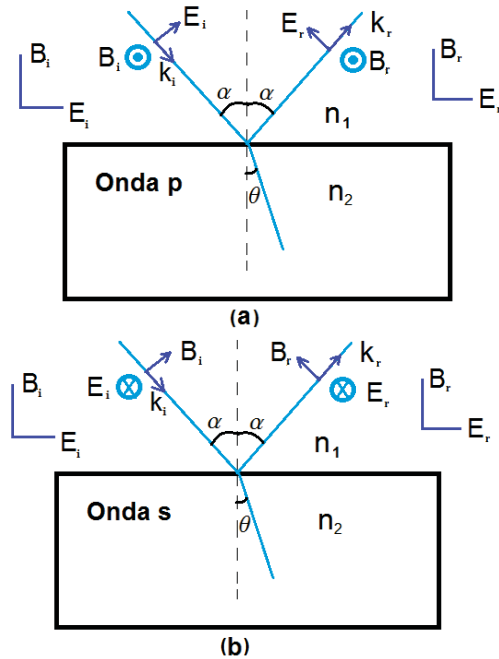


Figura 1. Las fases de (a) las ondas p y (b) las ondas s al reflejarse en un dióptrico plano. Aunque los vectores están representados lejos del punto de incidencia, en los cálculos consideraremos que están en su vecindad.

Para obtener las relaciones de Fresnel, primero se debe trazar un diagrama donde se muestre la orientación de los vectores eléctricos. No precisarlos previamente puede llevar a errores de interpretación de los resultados [1,2]. Nuestra elección se muestra en la figura 1.

La Fig. 1a representa esquemáticamente la incidencia de una onda p sobre la superficie de separación entre dos dieléctricos con índices de refracción n_1 y n_2 . La Fig. 1b representa la incidencia de una onda s . De los esquemas vectoriales representados al lado de la figura es fácil ver que la elección (arbitraria) de la orientación de los vectores que hicimos no incluye cambio de fase en reflexión. Más adelante veremos cómo saber si realmente hay cambio en la fase de la onda. En la figura se sigue el convenio usual para vectores normales al plano: el punto representa un campo cuyo vector intensidad sale del plano de la figura y la cruz un campo que entra en dicho plano. Para calcular los coeficientes se utilizan las condiciones de frontera en la superficie de separación entre los dos dieléctricos.

Si usamos este diagrama para calcular los coeficientes según las ecuaciones (2) debemos interpretar los signos de la expresión para saber si hay cambio de fase. Si para una combinación dada de índices de refracción y ángulo de incidencia el valor de r es negativo, esto significa que la fase de la onda reflejada cambia en π radianes respecto a la fase de la onda incidente. Si es positivo, la fase no cambia. Siempre es imprescindible aclarar cuál es la disposición de los vectores usados para obtener las ecuaciones. Si para hacer los cálculos de r y t se hubiera escogido una orientación de los vectores tal que las fases antes y después tuvieran una

diferencia de π radianes, un resultado positivo diría que hay cambio de fase, y si el valor del coeficiente fuera negativo, no habría cambio.

Para la disposición particular de la figura 1 las relaciones de Fresnel quedan:

$$r_p = \frac{E_{0r}}{E_{0i}} = \frac{\tan(\alpha - \theta)}{\tan(\alpha + \theta)}, \quad (3a)$$

$$r_s = \frac{E_{0r}}{E_{0i}} = \frac{\sin(\theta - \alpha)}{\sin(\alpha + \theta)}. \quad (3b)$$

De la ecuación (3a), por ejemplo, se deduce que si $n_1 > n_2$ (i. e. $\theta > \alpha$) y $\alpha + \theta < \pi/2 \Rightarrow r_p < 0$, lo que indica que hay cambio de fase en reflexión. No analizaremos los valores de t , pues no es difícil demostrar que la onda transmitida nunca cambia su fase.

Es importante resaltar que estos resultados son solo válidos para las superficies de separación entre dieléctricos. Una generalización para distintos tipos de materiales y tipos de onda puede encontrarse en [3].

III CAMBIOS DE FASE EN REFLEXIÓN

La figura 2 muestra el valor de r para ambos tipos de onda en el caso que el segundo medio sea ópticamente más denso y la elección de la orientación de los vectores sea la de la figura 1. Es fácil ver que en este caso r_s es siempre negativo (una onda s siempre cambia la fase en π radianes al reflejarse en un medio más denso), mientras que la onda p solo cambia la fase para ángulos de incidencia mayores que el ángulo de Brewster ($\alpha_B + \theta = \pi/2$).

La conclusión es clara: si una onda de polarización arbitraria incide sobre la superficie de separación entre un medio ópticamente menos denso y otro más denso, la onda reflejada tendrá su fase invertida respecto a la onda incidente sólo para ángulos de incidencia mayores que α_B .

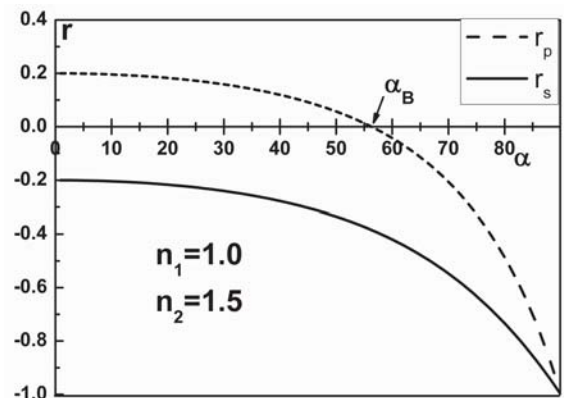


Figura 2. Coeficiente de reflexión en amplitud para ambas ondas en el caso de un segundo medio más denso.

El caso de un segundo medio menos denso (figura 3) es diferente. Aquí la onda s nunca cambia su fase, mientras que la onda p la cambia en π radianes para ángulos de incidencia

menores que el ángulo de Brewster.

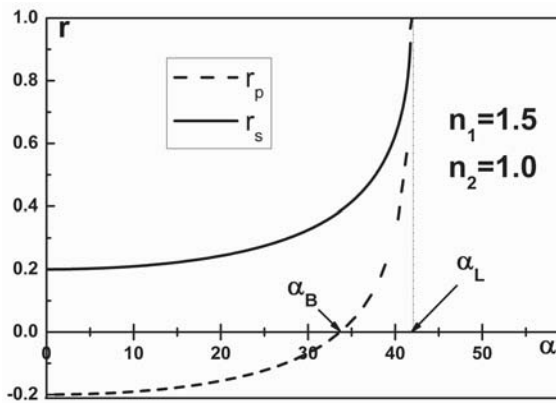


Figura 3. Coeficiente de reflexión en amplitud para ambas ondas en el caso de un segundo medio menos denso.

La conclusión a la que se llega es que el cambio de fase de una onda al reflejarse dependerá de su estado de polarización. En la figura puede verse también la presencia del ángulo límite de reflexión total: para ángulos mayores que α_L la energía de la onda no penetra el segundo medio (aunque el campo eléctrico si lo hace [4]). En este caso ambos coeficientes de reflexión se hacen complejos y la diferencia de fase entre ambas ondas varía de manera complicada entre 0 y π radianes [4,5].

Con estas ideas vamos a analizar algunos libros de Física General ampliamente utilizados en las Universidades.

IV ANÁLISIS DE LA LITERATURA USADA EN LA DOCENCIA

Dos de los libros más utilizados como textos de Física General en las universidades cubanas (al igual que de otros países) son la "Física" de la autoría de Reissnick, Halliday y Krane (RHK, anteriormente "Física para estudiantes de Ciencias e Ingeniería") y la "Física Universitaria" originalmente publicado por Francis Weston Sears y Mark W. Zemanski (SZ), y ahora escrito por Hugh Young y Roger Freedman. Para el análisis que haremos en el presente artículo utilizaremos la tercera edición en español (traducción de la cuarta edición en inglés) para el primero [6] y la decimosegunda edición en español para el segundo [7].

Ambos libros son escritos en esencia para estudiantes de ingeniería, por lo que brindan gran cantidad de aplicaciones, además de una buena presentación fenomenológica de las diferentes situaciones físicas estudiadas. Sin embargo, en ocasiones pueden ser poco rigurosos en el formalismo matemático a aplicar. Esta "relajación" es en general usada con el objetivo de facilitar la comprensión, a menudo con éxito. No obstante, puede llevar a conclusiones erradas acerca de fenómenos físicos tan importantes como el cambio de fase por reflexión. Veamos el tratamiento que le dan ambos libros a este fenómeno.

En el RHK el tema de los cambios de fase por reflexión se estudia en el capítulo 45, Interferencia, en particular en los

epígrafes 45.4 y 45.5, referidos a la interferencia en películas delgadas.

En el punto se discute la interferencia por reflexión en "una película transparente de espesor d , iluminada con luz monocromática de longitud de onda λ por una fuente puntual S " (pág. 404). En el pie de la figura 12 se aclara que el medio a ambos lados es aire. En la discusión que sigue, basándose en la figura 11 del capítulo 45, se llega a la conclusión que en alguna de las dos reflexiones (cara anterior o cara posterior) debe existir un cambio de fase de π rad por reflexión en la separación aire – película. A continuación se expresa (pág. 405): "Tal como sucede, sólo el rayo que se refleja en la superficie anterior experimenta este cambio de fase. El otro rayo no cambia abruptamente de fase, ya sea en la transmisión a través de la superficie anterior o en la reflexión en la superficie posterior."

A continuación se dice "Para resumir la situación óptica, cuando la reflexión ocurre en una interfaz más allá de la cual el medio tiene un índice de refracción *menor*, la onda reflejada *no* experimenta ningún *cambio de fase*; cuando el medio más allá de la interfaz tiene un índice *mayor*, existe un cambio de fase de π " (las cursivas son del original). Una nota al pie aclara: "Estas afirmaciones [...] deben modificarse cuando la luz incide sobre un medio menos denso con un ángulo tal que se presente reflexión interna total. Deben modificarse también en el caso de reflexión de superficies metálicas".

Estas aseveraciones, como ya vimos, no son en general ciertas: hay casos en que la onda, incluso en incidencia normal, no cambia su fase al reflejarse en un medio ópticamente más denso. El caso más notable es el de una onda plano polarizada de tipo p , que solo cambia de fase si el ángulo de incidencia es mayor que el ángulo de Brewster al pasar de un medio menos denso a uno más denso.

En la pág. 405 se continúa el análisis luego de deducir las condiciones de máximo y de mínimo de reflexión: "Estas ecuaciones se cumplen cuando el índice de refracción de la película es mayor o menor que los índices de los medios a cada lado de la película. Sólo en estos casos existirá un cambio de fase relativo de 180° para reflexiones en las dos superficies". Es fácil demostrar que incluso en estos casos no siempre hay cambio de fase relativo entre los dos rayos. Para esto usaremos las relaciones de Fresnel.

Supongamos que tenemos una lámina delgada plano paralela formada por un material con un índice de refracción n_2 , entre dos medios de índice de refracción n_1 y n_3 menores que n_2 . Supongamos, para hacer más sencillo el análisis, que $n_1 = 1.000$ (vacío o aire). Demostremos que hay valores de n_3 para los cuales no hay cambios de fase en reflexión. El ángulo de Brewster del primer medio es: $\theta_{B1} = \tan^{-1}(n_2/n_1) = \tan^{-1} n_2$. Si el ángulo de incidencia sobre el primer medio $\alpha_1 > \theta_{B1}$ la onda reflejada cambia de fase, la transmitida no. Si al llegar al segundo medio el ángulo de incidencia es mayor que el ángulo de Brewster de este $\alpha_2 > \theta_{B2}$ no hay cambio de fase, y entre los dos rayos reflejados aparece un desfase adicional de π rad. Sin embargo si $\alpha_2 < \theta_{B2}$ hay cambio de fase también en el segundo medio, y no lo hay entre los dos rayos

reflejados. Esto influye, naturalmente, en los resultados de la interferencia. Aplicando dos veces la ley de la refracción, y conociendo los valores de los ángulos de Brewster, no es difícil demostrar que en las condiciones expresadas arriba el valor de n_3 para que no haya inversión de la fase debe cumplir:

$$n_3 > n_2 \tan \left\{ \sin^{-1} \left[\frac{n_1}{n_2} \sin \alpha_1 \right] \right\} \quad (4)$$

Dando valores concretos a los índices en la Eq. (4) es posible encontrar situaciones en las cuales para medios con índices de refracción que cumplen $n_1 < n_2 > n_3$ no aparece cambio de fase en π rad entre los rayos reflejados en la primera y la segunda superficie de la lámina delgada.

En el epígrafe 45-5 [5] se completa el análisis usando el método de Stokes. Luego de llegar a la conclusión correcta de que los coeficientes de amplitud en reflexión al ir de un medio uno a otro dos y a la inversa cumplen $r_{12} = -r_{21}$, se dice textualmente "El experimento demuestra que el rayo reflejado desde el medio ópticamente más denso sufre un cambio de fase de 180° ". Para justificar el aserto, se basan en la instalación experimental conocida como espejo de Lloyd. En este sistema, la luz que emite una fuente puntual llega por dos caminos diferentes a una pantalla: directamente, y luego de reflejarse en un espejo (ver fig. 18 en dicho epígrafe). Este experimento se diferencia del experimento de Young porque el rayo que se refleja en el espejo sufre (como afirman correctamente los autores) un cambio de fase de π rad. Pero ellos concluyen: "Esto demuestra que la reflexión desde un medio ópticamente más denso implica un cambio de fase de 180° ". El cambio de fase que sufre el haz reflejado desde el espejo (¡cualesquiera sea su estado de polarización!) se debe a que se ha reflejado desde un medio ópticamente más denso *con un ángulo de incidencia mayor que el ángulo de Brewster*. Esto es fácil de probar viendo la disposición del espejo y la pantalla en dicho experimento.

En el Sears-Semansky, en el epígrafe 35.4 del segundo tomo, se comienza explicando el fenómeno del cambio de fase por reflexión, aunque solo se ve el caso de reflexión casi normal en placas delgadas, donde el patrón de interferencia obtenido es "el inverso del esperado". Se analiza en particular la relación entre los campos eléctricos incidente y reflejado en la onda s , aunque no se haga uso de este término en particular.

De nuevo se plantea correctamente que la reflexión en superficies complementarias (de n_1 a n_2 y de n_2 a n_1) provoca entre los dos rayos un cambio de fase relativo de π rad. Sin embargo, de nuevo se dice que el cambio de fase ocurre en el rayo que va hacia el medio ópticamente más denso. Y como justificación se dice que en reflexión (para incidencia normal) se tiene que cumplir (hay un cambio de nomenclatura entre el libro y el presente artículo que no cambia el análisis):

$$E_r = \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} E_i \quad (5)$$

Esta ecuación, introducida sin demostración, queda como la única relación existente entre los campos incidente y reflejado. De ahí salen los casos obvios: $n_1 < n_2$, $n_1 > n_2$

y $n_1 = n_2$, representados en las figuras 2 y 3 con líneas continuas.

Claro está, si $n_2 > n_1$ el signo de E_r será contrario al de E_i , por lo que habrá un cambio de fase relativo de π rad. Pero esto es cierto sólo para la onda s , si incide una onda p las conclusiones serán contrarias. Y si el ángulo comienza a aumentar, sabemos que al ser el ángulo de incidencia mayor que el de Brewster las conclusiones cambian. Para hacer las cosas peores, este error se repite en la estrategia de resolución de problemas al final del epígrafe.

Incluso libros muy serios, como por ejemplo el Óptica de Landsberg [8], tratan el tema de forma descuidada. En el capítulo 6, epígrafe 25, al analizar la aparición de franjas de interferencia en cuñas se dice: "En el curso de los cálculos, además de la inmediata diferencia geométrica de recorrido de las ondas interferentes, es necesario considerar el salto de la fase en π experimentado por la onda representada por el rayo 2' al reflejarse ésta en la superficie de la cuña con índice de refracción, mayor que el del aire que rodea la cuña." O sea, sin precisar el estado de polarización de la onda se supone que es el rayo que se refleja en la primera superficie el que cambia la fase.

CONCLUSIONES

Como hemos visto, en dos libros utilizados ampliamente por los estudiantes de Ingeniería, y algunos estudiantes de Ciencias Naturales del país, hay un error conceptual relacionado con la no aplicación de las relaciones de Fresnel en los problemas de reflexión en láminas delgadas.

Es importante la discusión de estos aspectos en los colectivos metodológicos dedicados a la enseñanza de la Física General, en particular la relativa a la Óptica, para que este error no sea transmitido a los estudiantes.

Un libro recomendable para guiar el trabajo es el excelente tratado de Óptica de la autoría de E. Hetch [5], donde se hace una discusión exhaustiva del tema. Aunque su nivel no es de Física General, puede servir como libro de consulta para profesores y alumnos.

- [1] G. Friedmann y H. S. Shandu, Am. J. Phys. **33**, 135 (1965).
- [2] H. S. Shandu y G. Friedmann, Am. J. Phys. **39**, 388 (1971).
- [3] J. Leckner, Am. J. Phys. **58**, 317 (1990).
- [4] M. Born y E. Wolf, *Principles of Optics*, 6^{ta} Ed. (Pergamon Press, Oxford, 1980).
- [5] E. Hetch, *Óptica*, 3^{ra} Ed. (Addison Wexley, Madrid, 2000).
- [6] R. Reisnick, D. Halliday y K. S. Krane, *Física*, 3^{ra} Ed. (John Wiley & Sons Inc., 1999).
- [7] H. D. Young y R. A. Freedman, *Física Universitaria*, 12^{da} Ed. (Pearson Educación de México, 2009).
- [8] G. S. Landsberg, *Óptica*, 1^{ra} Ed. Español (Mir, 1983).

VELOCITY PROFILE OF GRANULAR FLOWS DOWN A HEAP DESCRIBED BY DIMENSIONAL ANALYSIS

PERFIL DE VELOCIDADES DE UN FLUJO GRANULAR EN UNA PILA CUASI-BIDIMENSIONAL DESCRITO POR ANÁLISIS DIMENSIONAL

E. MARTÍNEZ^{a†}, O. SOTOLONGO-COSTA^a, A. J. BATISTA-LEYVA^{a,b} AND E. ALTSHULER^a

a) "Henri Poincaré" Group of Complex Systems, Physics Faculty, University of Havana, 10400, Havana, Cuba. emartinez@fisica.uh.cu[†]

b) Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC), Salvador Allende, La Habana 10600, Cuba.

[†] corresponding author

Received 07/04/2015; Accepted d/m/2015

Gravity-driven thick granular flows are relevant to many industrial and geophysical processes. In particular, it is important to know and understand the particle velocity distributions as we get deeper into the flow from the free surface. In this paper, we use dimensional analysis as a tool to reproduce the velocity profile experimentally reported for granular flows down a confined heap for the so-called flowing layer and the creep layer underneath: the grains velocity first decrease linearly from the free surface, and then exponentially.

Los flujos granulares gruesos causados por la gravedad son relevantes para numerosos procesos industriales y geofísicos. En particular, es importante conocer y entender las distribuciones de velocidades de las partículas en la medida en que penetramos en el flujo desde la superficie libre. En este artículo, utilizamos el análisis dimensional como herramienta para reproducir el perfil de velocidades caracterizado experimentalmente para flujos granulares en una pila confinada, tanto para la llamada capa fluida, como para la capa "creep" bajo ella: la velocidad de los granos decrece primero linealmente desde la superficie y luego exponencialmente.

PACS: Granular flows, 45.70.Mg; granular materials rheology, 83.80. Fg; shear rate dependent viscosity, 83.60 Fg.

I INTRODUCTION

Agriculture and food industries, mining, metallurgy, transportation, construction and pharmacology are examples of human activities where granular materials are basic ingredients [1]. On the other hand, the study of granular matter has shown to be a source of concepts and theoretical methods useful in many branches of research [2].

Granular flow is one of the most important mechanisms in granular dynamics, although it is not easy to describe. Three regimes can be defined: a) jammed (or static) state, where the grain's inertia is not essential, b) "gaseous" state, where interaction through binary collisions dominates the dynamics and c) dense flow regime, which can be described through "hydrodynamic" equations.

This last regime is commonly present in our life: avalanches, landslides, sand dunes displacement and flows of grains through funnels, hoppers or silos are some examples [3]. For that reason many experimental and theoretical work have been devoted to understand it in detail [4–6].

Here, we will concentrate on the description of dense flows down a heap (figure 1 a): the fluid layer of granular matter is moving on a heap of nearly static grains. Two vertical glass plates (separated by a gap W) confine the grains and the flow rate is regulated by an external hopper. The pile slope in a steady flow is self-adjusted as a result of the stress distribution inside the heap and the friction against the walls. The velocity profile is composed by an upper linear part (near the free surface) followed by an exponential

tail deeper inside the granular flow. The distance from the free surface to the boundary between the two regions is given by $h \sim (Q/(d\sqrt{gd}))^{1/2}$, where d is the grain's diameters, g is gravity's acceleration and Q , the input flux of the granular material (given as area/time) [6].

The flow is typically assumed as dense which facilitates to model it using hydrodynamics-like equations. This characterization raises many difficulties because of the lack of detailed information on the microscopic behavior of the grains. Nonetheless, for the description and interpretation of the experimental results (in particular the velocity profiles) a simple but powerful method has been used: *the dimensional analysis* [5, 7]. The key to apply it is to identify which are the essential parameters of a particular phenomenon. Magnitudes related amongst themselves (e.g. density, mass and volume) are rarely included at a time in the set of relevant parameters and the goal is obtain a set of *independents* magnitudes to describe the physics of the problem. The following step is to select a set of basic units and search for the possible dimensionless numbers using the Buckingham's Pi theorem, so as to obtain the functional dependencies among the magnitudes describing the granular medium [8–11].

Previous works [5, 6, 12] have built a local rheology and developed a "microscopic" model for grain-grain interactions using dimensional analysis and an empirical law for the effective friction (μ_{eff}). The experiments have revealed that "microscopic" parameters such as grain friction, shape and effective restitution coefficient, are somehow included into μ_{eff} [13]. In [12] the authors propose

that the basic magnitudes controlling these flows are: grain size (d), normal stress (P), shear stress (τ), shear rate ($\dot{\gamma}$) and effective density of the flow (ρ). The influence of the gravity and the flow's height were included in P , τ , and $\dot{\gamma}$. From those parameters they obtained two dimensionless numbers: τ/P and $I = \dot{\gamma}d / \sqrt{P/\rho}$. The first one is interpreted as the effective friction and the second is the ratio of two different timescales at the grain level: $1/\dot{\gamma}$ and $d / \sqrt{P/\rho}$. In figure 2 appears a simplified sketch illustrating the meaning of these timescales. The number I represents the "competition" between the inertia and the confining effects on grains. Assuming an empirical expression for $\mu_{eff}(I)$, it was possible to find a Bagnold-like velocity profile for an inclined plane and the linear velocity profile in the shear plane and in the heap, but it was not possible to obtain the exponential tail in this last configuration [5,6,12].

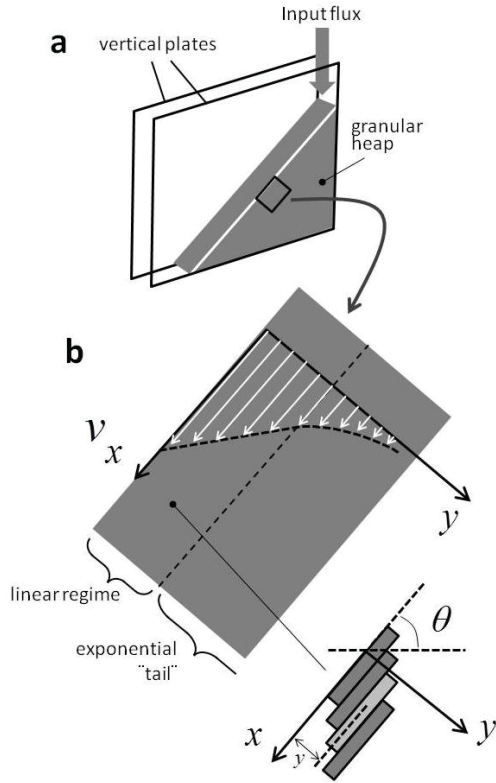


Figure 1. Schematic representation of the velocity profile in a heap. a) A heap confined in Hele-Shaw cell. b) Detail of the velocity profile in a steady-state granular flow: the upper part is linear; deeper we can find an exponential tail. We can consider the granular flow as a many layer of grains slipping one above the other. The z -axis is perpendicular to the paper.

II RESULTS AND DISCUSSION

Our objective is to find the two velocity profiles in a heap confined between vertical plates under a unique description. For that, we consider a non-local rheology where an order parameter ($\psi \in [0,1]$) is varied to determine the influence of the static grains on the fluid layer [14]. Granular flow is regularly thought to be visco-plastic [12], thus the stress tensor (σ) is modeled as the sum of three components [14]: a viscous term ($\eta\dot{\gamma}$), where η is the viscosity, the hydrodynamic pressure (P) and a stress (τ_0) corresponding to the quasi-static

behavior. We can evaluate the influence of this last parameter through the expression ($\psi\tau_0$), that we use in the calculation of $\sigma = \eta\dot{\gamma} + P + \psi\tau_0$. When $\psi = 0$, the granular flow's behavior resembles a viscous flow; if $0 < \psi \leq 1$ and $\eta\dot{\gamma} + P \sim \tau_0$, we have a visco-plastic flow, else ($\eta\dot{\gamma} + P \ll \tau_0$), the flow is in a quasi-static regimen [13].

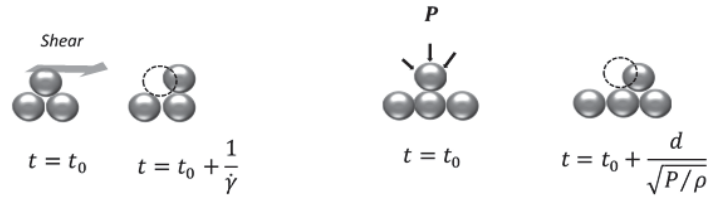


Figure 2. Simple diagrammatic of the physical meaning of two different timescales at the grain level. The interval $\tau_{shear} = 1/\dot{\gamma}$ represents the time needed by the grains to "climb" over a next particle because of the shear stress. Other interpretation is the macroscopic time needed for one layer to travel respect the other. In case of $\tau_{pressure} = d/\sqrt{P/\rho}$, represent the time needed by the grain to "fall" into a hole at a lower position due to the confining pressure.

Finally, we assume (as other authors [5,14]) that the flow of grains can be described by the Navier-Stokes equation using the previous stress tensor. Thus, the parameters that appear in this equation are the main magnitudes controlling the properties of the flows. Moreover, we must include the size of the grain as the only granular lengthscale in the dimensional analysis. The influence of other lengths related with the geometry is established either by a macroscopic parameter like P or a "microscopic" one such as τ_0 , V (velocity of grains) or $\dot{\gamma}$. Likewise, these parameters determine the effect of the flow rate variation. As the flows mentioned are described in a steady state we do not take the time into account. In summary, the magnitudes employed in the analysis are: d , g , ρ , V and σ . For different dependences of σ with ψ , we can obtain the different shapes of the velocity profile.

Case 1: "Visco-plastic" fluid ($0 < \psi \leq 1$ and $\eta\dot{\gamma} + P \sim \tau_0$).

In this flow we can observe two kinds of flowing layers: one, close to the free surface where the grains behave like a granular "gas" and another, below the previous layer, where the grains flows like a liquid, experiencing enduring contacts [5,6,12]. Our analysis concerns the latter.

Here we introduce the magnitude τ_0 and we take η as an independent magnitude in the analysis. The velocity not only depends on P , but also on the nature of the "microscopic" inter-grains interaction. Therefore V appears as an independent parameter as well. Finally, we note that gravity influences both P and the inter-grains friction. In conclusion, we use d , ρ , $\dot{\gamma}$, P , τ_0 , η , V and g as our set of basic magnitudes. In order to diminish the number of dimensionless combinations we enlarged the number of basic units, taking into account that the length's dimension changes according to the direction, thus, they are L_x , L_y or L_z [11]. We will use the coordinate system represented in figure 1 b to denote the x , y and z directions, where the last one is perpendicular to the paper. We will employ only the

component of the gravity's accelerations in the y direction, because it is an experimental fact that in the x direction the velocity of the grains flowing in a heap is constant [15] as a result of the compensation of the effect of the component of g in this axis and the dissipative shocks between grains.

Then, we have five basic units (the previous plus mass and time) and we can construct only three dimensionless numbers: τ_0/P , $\tau_0/\rho dg$ and $\eta\dot{\gamma}/\rho dg$. We draw the constancy of the shear rate ($\dot{\gamma} = \partial V/\partial y$) from the following expression:

$$\dot{\gamma} = C_a \frac{\rho dg}{\eta} F\left(\frac{\tau_0}{P}, \frac{\tau_0}{\rho dg}, \theta_c\right). \quad (1)$$

Here, C_a is a dimensionless constant and the functional shape of F is unknown for dimensional analysis. Besides, the magnitude θ_c (the angle of repose of the heap) must be included as another dimensionless number that characterizes the interactions between grains.

As the height of the flow increases, the friction against the wall and pressure rises too; we can therefore keep the assumption about the independence of τ_0/P with height of the fluid layer, based on the fact that the influence of the wall is taken into account in τ_0 . Unlike τ_0/P , the rate $\tau_0/\rho dg$ does not include the competition between tangential and normal tensions, but only the effect of the inter-grain and grain-wall frictions. In reference [6] the authors conclude: "The velocity gradient inside the flowing layer is identical for three different materials (glass, steel and aluminum)". That means that the variation of the friction details does not produce changes: modifications in both P and τ_0 can occur in such a way that their ratio keeps constant independently from y . We can then conclude that F does not depend significantly on $\tau_0/\rho dg$ at different heights of the flow. So, if we integrate (1) over the y direction we obtain a linear velocity profile.

Case 2: Quasi-static regimen ($0 < \psi \leq 1$ and $\eta\dot{\gamma} + P \ll \tau_0$).

In this configuration the most important mechanism of interaction between grains is the frictional contact. This implies that the shear of the creep layer and pressure are less significant than the *grain-grain* and *grain-wall* frictions, both included in τ_0 . Again g , d and ρ are relevant to our scenario. Besides, we take into account the velocity of grains in this layer and, in order to establish a difference with the typical velocity V associated to the fluid layer, we named the former as V_{creep} . Although we do not include the shear rate, it is a matter of fact that there is a velocity gradient along the height of this layer which we must include in the analysis as $\partial V_{creep}/\partial y$. This expression is mathematically identical to $\dot{\gamma}$, but the physical meaning of these magnitudes are different: $\partial V_{creep}/\partial y$ includes, not only the effect of the shear stress or the pressure, like $\dot{\gamma}$, but also includes the contact friction between the grains.

Given g , d , ρ , τ_0 , V_{creep} and $\partial V_{creep}/\partial y$ and the appropriate number of basic units (five, as before) we can construct just one dimensionless combination. In the Appendix 1 we show

that only if we use the characteristic size of the grains in the direction of the y -component of the gravity (along the height of the layer) we can produce the observed exponential velocity profile [5, 6, 16]. Using a different direction of the grain's typical size entails incorrect functional dependences as shown in Appendix 1.

The dimensionless number we refer to is $(d/V_{creep})(\partial V_{creep}/\partial y)$. After integrating this expression we obtain the profile:

$$V_{creep} \sim \exp\left(\hat{C}_a \frac{y}{d}\right), \quad (2)$$

where $\hat{C}_a$ is a dimensionless constant, that depends of θ_c , and the zero of the y axis is taken at the interface between the flowing and creep layers. In agreement with the experimental results, in (2) appears that the "attenuation length" of the velocity is of the order of d .

Our procedure is also corroborated by this fact: when the grain employed are not spherical but ellipsoidal, the semi-axis defined as the grain's "diameter" in order to adjust the exponential velocity profile, has to be parallel to the direction along the height of the layer, according to our selection of the d dimension (L_y) [16].

As a final result, in the Appendix 2 we apply dimensional analysis to another geometries that had been extensively studied, and we obtain the same velocities profiles reported in the literature for these configurations [5, 11].

CONCLUSIONS

With all these results we can do an interpretation of the transition between one velocity profile functional dependence to the other, which is an outcome of the variation of granular packing. The experimental validation can be done in the flow on a heap because two velocity profiles coexist. It is reported that the volume fraction is much higher in the creep layer (which is, besides, roughly constant here) than in the flowing layer (which decreases quickly) [5]. Thus, in the former layer are more significant the effects of the forces between grains, which is considered here through the values of the order parameter ψ .

Using dimensional analysis we have been able to reproduce the velocity profile experimentally reported for granular flows down a confined heap for the flowing layer and the creep layer underneath: the grains velocity first decreases linearly from the free surface, and then exponentially.

Our choice of parameters for the dimensional analysis of the flowing layer is based on the experimental fact that there the interactions between grains occurs *via* collisions and shear. In the case of the creep layer, we assume that the interactions are mainly frictional, which is expected from the higher, and constant, packing fraction in that region.

ACKNOWLEDGEMENTS

The authors are grateful to A. González-Lezcano for his contribution to some figures as well as for valuable

discussions and comments.

APPENDIX 1: DETAILS OF THE DIMENSIONAL ANALYSIS

Case 1 (fluid layer in the heap)

Magnitudes: V , $\dot{\gamma}$, η , τ_0 , g , d , ρ .

Fundamentals dimensions: L_x , L_y , L_z , T , M .

Dimensional matrix (Table 1).

Table 1. Table to obtain the dimensional matrix for case 1. The matrix is constructed by selecting columns of the table in different, physically sound, combinations. We only consider related combinations: in our case, those between viscosity and shear stress.

	V	$\dot{\gamma}$	η			τ_0			g	d			ρ
			I	II	III	I	II	III		I ^I	II ^I	III ^I	
L_x	1	1	-2	-1	-1	-1	0	0	0	1	0	0	-1
L_y	0	-1	1	0	1	0	-1	0	1	0	1	0	-1
L_z	0	0	0	0	-1	0	0	-1	0	0	0	1	-1
T	-1	-1	-1	-1	-1	-2	-2	-2	-2	0	0	0	0
M	0	0	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	1

Rank: **4**, for the combinations $III-I^I$ and $III-II^I$; **5** for the other ones. Just in the combination $I-III^I$ the magnitudes V and $\dot{\gamma}$ appears in only one of the two dimensional number that could be formed. For the other combinations these variables appear in both dimensional numbers and we can't determine completely the functional dependence of the velocity profile.

Dimensionless number, without V and $\dot{\gamma}$, for the combination $I-III^I$: $\frac{\tau_0}{\rho d g}$.

Dimensionless number, with V and $\dot{\gamma}$, for the combination $I-III^I$: $\frac{\eta \dot{\gamma}}{\rho d g}$.

Case 2 (creep layer in the heap)

Magnitudes: V_{creep} , $\frac{\partial V_{creep}}{\partial y}$, τ_0 , g , d , ρ .

Fundamentals dimensions: L_x , L_y , L_z , T , M .

Dimensional matrix (Table 2).

Table 2. Table to construct the dimensional matrix for case 2.

	V_{creep}	$\frac{\partial V_{creep}}{\partial y}$	τ_0			g	d			ρ
			I	II	III		I ^I	II ^I	III ^I	
L_x	1	1	-1	0	0	0	1	0	0	-1
L_y	0	-1	0	-1	0	1	0	1	0	-1
L_z	0	0	0	0	-1	0	0	0	1	-1
T	-1	-1	-2	-2	-2	-2	0	0	0	0
M	0	0	1	1	1	0	0	0	0	1

Rank: **4**, for the combinations $III-I^I$ y $III-II^I$; only in the first one is possible construct two dimensionless number where in only one appears V and $\dot{\gamma}$. **5** is the rank for the others combinations.

Dimensionless number for the combination $I-I^I$, $II-I^I$: $\frac{d^2 g}{V_{creep}^3} \frac{\partial V_{creep}}{\partial y}$.

Dimensionless number for the combination $I-II^I$, $II-II^I$: $\frac{d}{V_{creep}} \frac{\partial V_{creep}}{\partial y}$.

Dimensionless number for the combination $I-III^I$: $\frac{d \rho g}{\tau_0}$.

Dimensionless number for the combination $II-III^I$: $\frac{\rho^2 d^2}{\tau_0^2} \frac{\partial V_{creep}}{\partial y} V_{creep} g$.

Dimensionless number for the combination $III-III^I$: $\rho^2 g V_{creep}^3 \left(\frac{\partial V_{creep}}{\partial y} \tau_0^2 \right)^{-1}$.

Dimensionless number, without V_{creep} and $\frac{\partial V_{creep}}{\partial y}$, for the combination $III-I^I$: $\frac{d \rho g}{\tau_0}$.

Dimensionless number, with $\frac{\partial V_{creep}}{\partial y}$, for the combination $III-I^I$: $\frac{d^2 g}{V_{creep}^3} \frac{\partial V_{creep}}{\partial y}$.

APPENDIX 2: OTHER FLOW GEOMETRIES

There are other two relevant configurations (figure 3) where a simple shear flow is produced and its rheological properties can be measured [6, 12].

The most simple of these geometries is the plane shear (figure 3 a): the shear is produced by the motion of the upper wall. For reasons of simplicity the influence of the gravity (g) is neglected and thereby the stress distribution is uniform in all the extension of the fluid [6, 12]. The velocity of the grains increases linearly in proportion to the height of the fluid layer.

Another well studied configuration is the flow on inclined plane (figure 3 b and c), which is frequent in both geophysical and industrial circumstances. The set-up is a rough and rigid plane at an angle (θ) over the horizontal and the flow rate is controlled through the opening of a gate fixed at the top of the plane. The experiments are conducted in such a way that the motion of the grains is stationary: in the steady-state, a uniform flow of height (h) is established and gravity acts as the driving force. The density (ρ) is assumed constant and the stress distributions are $\sigma_{tan} = \rho g h \sin(\theta)$ and $\sigma_{nor} = \rho g h \cos(\theta)$: the former characterizes the tangential stress and the latter, the normal stress. The velocity profile in the flow for big h is a Bagnold-like profile ($V \sim h^{3/2}$) and for small h the shape of the profile is linear.

In all cases the flow is also regarded as dense, therefore the description is regularly conducted from a hydrodynamic

perspective, besides we follow the same method presented in the paper to describe the velocity profile on a heap.

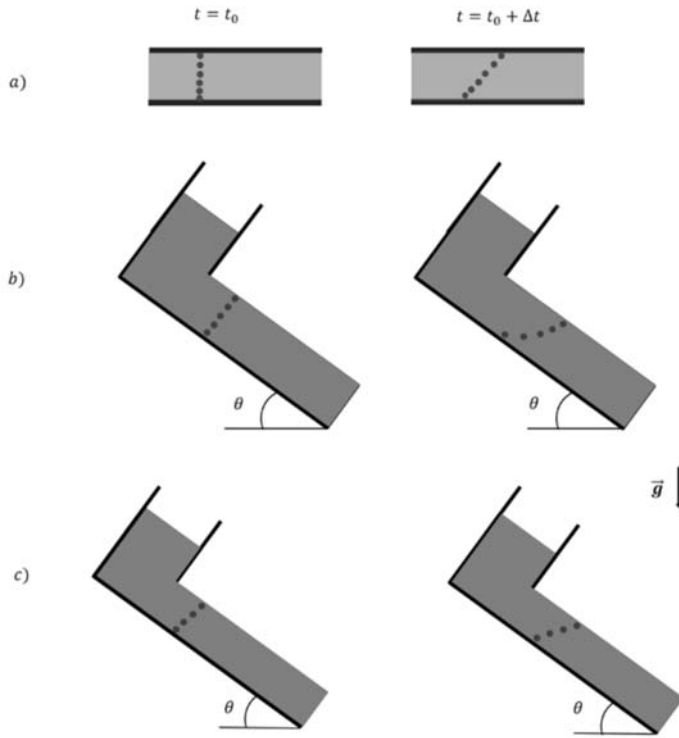


Figure 3. Another two common configurations to characterize granular flows. a) Plane shear, b) incline plane with a big height of the fluid layer and c) incline plane with a thin fluid layer. The dark spots are grains represented in two distinct time instants.

Case 1A: “Viscous” fluid ($\psi = 0$).

Geometry: Plane shear.

Gravity is not included and the information about the velocity of grains and the viscosity are contained in P and $\dot{\gamma}$ [5,6,17]. This means that the magnitudes involve are d , ρ , $\dot{\gamma}$ and P . We take as basic units: length (L), mass (M), and time (T). This makes possible to find the number I and obtain the linear velocity profile experimentally reported [5,6,12].

Geometry: Inclined plane (big h)

The only difference with the previous geometry is in P . Here its value is not constant as in the plane shear, though it still contains the information about the height of the flow (implicitly, the velocity) and gravity ($P \sim \rho gh$). Once again, the magnitudes are d , ρ , $\dot{\gamma}$ and P , the basic units are the same as before, so we can obtain the number I and the Bagnold-like

profile as has been reported before [6,11]. The incline angle is a dimensionless magnitude on which the number I relies, but this functional relation can’t be established by dimensional analysis.

Case 2A: “Visco-plastic” fluid ($0 < \psi \leq 1$ and $\eta\dot{\gamma} + P \sim \tau_0$).

Geometry: Incline plane (small h)

The dependence here is the same as that obtained for the fluid region in the heap: a linear profile. We can interpret this result as follows: as the height of the flow is small, the action of the rough bottom is significant and acts as a source of frictional forces that affects at the most part of the flowing grains. For this reason appears explicitly the magnitude τ_0

- [1] K. K. Rao and P. R. Nott. *An introduction to granular flow* (Cambridge University Press, New York, USA, 2008)
- [2] S. J. Antony, W. Hoyle and Y. Ding (Editors). *Granular Materials: fundamentals and applications* (The Royal Society of Chemistry, Cambridge, UK, 2004)
- [3] V. V. Kozlov *et al.* (Editors). *Traffic and granular flow’11*. (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, German, 2013)
- [4] E. Altshuler *et al.*, Phys. Rev. Lett. **91**, 014501 (2003)
- [5] B. Andreotti, Y. Forterre and O. Pouliquen, *Granular media* (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2013)
- [6] GDR MiDi, Eur. Phys. J. E **14**, 341 (2004)
- [7] T. Shinbrot *et al.*, Granular Matter **9**, 295 (2007)
- [8] L. P. Yarin. *The Pi-Theorem. Applications to Fluid Mechanics and Heat and Mass Transfer*, (Springer-Verlag Berlin, German 2012)
- [9] L. I. Sedov, *Similarity and dimensional methods in mechanics*. 10th edition (CRC Press Inc., Florida, USA, 1993)
- [10] Q. M. Tan, *Dimensional Analysis, with case studies in mechanics*. (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, German, 2011)
- [11] J. Palacios, *Análisis dimensional*. 2^{da} edición (Espasa-Calpe S.A., Madrid, España, 1964)
- [12] O. Pouliquen *et al.*, J. Stat. Mech. 07020 (2006). P. Jop *et al*, Nature **441**, 727 (2006)
- [13] O. Pouliquen *et al.*, J. Fluid Mech. **541**, 167 (2005)
- [14] I. S. Aranson and L.S. Tsimring, Phys. Rev. E **64**, 020301 (2001)
- [15] N-S. Cheng, Powder Tech. **218**, 11 (2012)
- [16] T. S. Komatsu *et al.*, Phys. Rev. Lett. **86**, 1757 (2001)
- [17] D. Ertras and T.C. Halsey, Europhys. Lett. **60**, 931 (2002)

ON THE NATURE OF THE L-TYPE Ca^{2+} CURRENT INACTIVATION IN RAT VENTRICULAR CARDIOMYOCYTES.

ACERCA DE LA NATURALEZA DE LA INACTIVACION DE LA CORRIENTE DE Ca^{2+} TIPO L EN CARDIOMIOCITOS VENTRICULARES DE RATA

J. ALVAREZ-COLLAZO, M. SAMPEDRO-CASTAÑEDA, L. GALÁN MARTÍNEZ, A.I. LÓPEZ-MEDINA, G. VASSORT, J. L. ALVAREZ[†]

Laboratorio de Electrofisiología. Instituto de Cardiología y Cirugía Cardiovascular. La Habana, Cuba. alvarezj@infomed.sld.cu[†]

[†] corresponding author

Recibido 01/05/2015; Aceptado 31/05/2015

Facilitation of cardiac L-type Ca^{2+} current (I_{CaL}) by high stimulation rates or by depolarizing prepulses is characterized by an increase in the fast inactivation time constant (τ_{fast}) of I_{CaL} . To explain this phenomenon, mechanisms related to calcium-dependent inactivation (CDI) have been considered. Here we studied in more detail the mechanism of I_{CaL} facilitation by depolarizing prepulses using isolated rat ventricular cardiomyocytes. Increases in τ_{fast} at a test pulse to 0 mV by low voltage (not activating I_{CaL}) prepulses were associated with hyperpolarizing shifts in I_{CaL} kinetics. Experimental conditions aimed to decrease CDI, by blocking the Ca^{2+} release from or its reload to the sarcoplasmic reticulum, did not abolish the increase in τ_{fast} by prepulses. Our results suggest that this kind of I_{CaL} facilitation is also associated to a strong voltage-dependent mechanism. A model is proposed in which depolarizing prepulses allow the Ca^{2+} channel to dwell longer times in the open state.

La facilitación de la corriente de Ca^{2+} tipo L cardíaca (I_{CaL}) por alta frecuencia de estimulación o prepulsos despolarizantes (PP), consiste en un aumento en la constante de tiempo de inactivación rápida (τ_{fast}) de I_{CaL} . Para explicar este fenómeno se han considerado mecanismos relacionados a la inactivación dependiente de calcio (IDC). Nosotros estudiamos más detalladamente la facilitación de I_{CaL} por PP utilizando cardiomiocitos ventriculares de rata. El incremento en τ_{fast} en un pulso test a 0 mV por PP que no activan I_{CaL} se asoció a un desplazamiento hiperpolarizante de las cinéticas de I_{CaL} . Diferentes condiciones experimentales en las que la IDC estaba deprimida, por bloqueo de la liberación de Ca^{2+} desde o su recaptación hacia el retículo sarcoplasmático, no previnieron el incremento en τ_{fast} por PP. Nuestros resultados sugieren que este tipo de facilitación de I_{CaL} está también asociado a un mecanismo dependiente de voltaje. Se propone un modelo en el que los PP permiten al canal de Ca^{2+} estar más tiempo en el estado abierto.

PACS: Patch clamping in biophysics, 87.80.Jg; Cellular and subcellular biophysics, 87.15.A-, 87.16.A-; Biophysical techniques, 87.80.-y.

I INTRODUCTION

The L-type Ca^{2+} channels in the sarcolemma of cardiomyocytes provide the main influx pathway for Ca^{2+} which is an essential intracellular messenger that plays pivotal roles in many processes from electrogenicity to excitation-contraction coupling, as well as biochemical and gene regulation [1,2]. This pore-forming protein, encoded by the Ca_v 1.2 gene (CACNA1C or α_{1C}), undergoes conformation changes upon membrane depolarization and, due to the huge electrochemical gradient for Ca^{2+} ion across the sarcolemma (~20,000 fold concentration gradient and a negative resting membrane potential), gives rise to a voltage- and time-dependent gated calcium current (I_{CaL}), which quickly turns on (activation) to reach a peak, then slowly decays (inactivation) and returns to rest (deactivation) upon repolarization.

One of the most complex and intriguing phenomena of the biophysical properties of the L-type Ca^{2+} channel is the inactivation process, i.e. the decay of I_{CaL} during depolarization. I_{CaL} is inactivated by two mechanisms: a voltage-dependent inactivation (VDI) and a calcium-dependent inactivation (CDI) mechanisms. The first mechanism is common to many voltage-gated ion channels and was first described in the pioneering work of Hodgkin

and Huxley on the sodium channel of the squid giant axon [3]. The second mechanism is exclusive of L-type Ca^{2+} channels. The molecular determinants of VDI are the cytosolic ends of the S6 segments (the I-II linker, considered to be the inactivation gate); the NH_2 and COOH termini of Ca_v 1.2 are also involved in this process [2,4,5]. As well, the auxiliary β -subunit of the Ca^{2+} channel plays a role in VDI (see references in [2]). The CDI relies first, on local Ca^{2+} that enters via the L-type Ca^{2+} channels to the restricted subsarcolemmal space and second, on Ca^{2+} released from the sarcoplasmic reticulum [6,7]. Ca^{2+} binds to calmodulin (CaM) tethered to an IQ domain in the C-terminus of the channel [8] causing a conformational change in the channel that prevents the EF-hand in the C-terminus from interacting with the cytosolic I-II linker, which then occludes the channel pore, thus accelerating inactivation [9]. A second CaM-interacting domain in the N-terminal domain of Ca_v 1.2 channels can also mediate CDI in response to local rather than global Ca^{2+} [10,11]. Based on the conserved regulation of both VDI and CDI by the auxiliary β -subunit, CDI has been envisioned as a Ca^{2+} -dependent brake for a pre-existing VDI [9].

The time course of I_{CaL} inactivation has been usually fitted to two exponentials and the fast and slow time constants have been usually "assigned" to CDI and VDI, respectively e.g. [12,13]. Analyses of the relative contribution of CDI

and VDI to I_{CaL} inactivation have been based on this and are still under dispute. It has been suggested that the relative contribution of CDI to total inactivation of I_{CaL} is greater at negative potentials when VDI (which typically exhibits a U-shaped availability curve), is weak [6, 14, 15]. Under extreme non-physiological conditions, it has been suggested that VDI has a central role but, after β -adrenergic stimulation, CDI becomes the main inactivation mechanism due to a slow-down of VDI [14]. Nevertheless, using more physiological conditions, we have shown that the fast inactivation time constant of I_{CaL} of rat ventricular cardiomyocytes was slowed down after I_{CaL} was increased by β -adrenergic stimulation, as well as after manipulations not involving CDI [16, 17].

One striking property of L-type Ca^{2+} channels is that under certain conditions, voltage clamp steps after a rest period or prepulses before a test pulse can facilitate I_{CaL} , *i.e.* its fast inactivation phase is markedly slowed-down and even its amplitude could be slightly increased *e.g.* [13, 18]. However, although both CDI and VDI are involved in I_{CaL} inactivation, only mechanisms related to CDI (and CaM-CaM kinase II) have been considered to explain this facilitation. The presented arguments link the increase in the fast time constant of inactivation of I_{CaL} to a weakened CDI due to a decrease in sarcoplasmic reticulum Ca^{2+} load [13, 18]; see [19] for a recent review]. Taking into account that, as previously described, the fast inactivation phase of I_{CaL} could be slowed down after manipulations not involving CDI, the aim of this study was to further investigate whether the prepulse-induced facilitation of I_{CaL} in rat ventricular cardiomyocytes is only dependent of CDI-related mechanisms or has a voltage-dependent component.

II METHODS

Experiments were performed using male adult Wistar rats (180-200 g), heparinized (5000 UI/100 g weight) and anaesthetized with sodium thiopental (30 mg/100 g weight). Hearts were quickly removed and placed in cold Ca^{2+} -free Tyrode solution ($\sim 10^\circ C$). The enzymatic dissociation protocol to obtain single ventricular cardiomyocytes has been described elsewhere [20]. Myocytes thus obtained were kept at room temperature ($25^\circ C$) and used for experiments for 6-8 hours.

L-type Ca^{2+} current (I_{CaL}) was recorded using the whole cell patch-clamp technique [21] standardized in our laboratory. Liquid junction potential was compensated before establishing the gigaseal. No capacitance or leakage compensations were performed. The sampling interval was 50 μs and the recording bandwidth was 3 KHz. The sodium current was blocked with tetrodotoxin (TTX, 50 μM ; Alomone, Israel) and potassium currents were blocked by substituting all potassium by cesium in extra- and intracellular solutions (see below). Pipette resistance was 1.0 - 1.2 M Ω once filled with the intracellular solution. Membrane capacitance (C_M) and series resistance (R_S) were calculated on voltage-clamped cardiomyocytes as previously reported [22].

Current data of each cell was normalized to cell capacitance (current density in pA/pF). Average C_M was 176.8 ± 9.5 pF ($N = 45$). The uncompensated R_S was 4.2 ± 0.3 M Ω . R_S could be electronically compensated up to 50% without ringing.

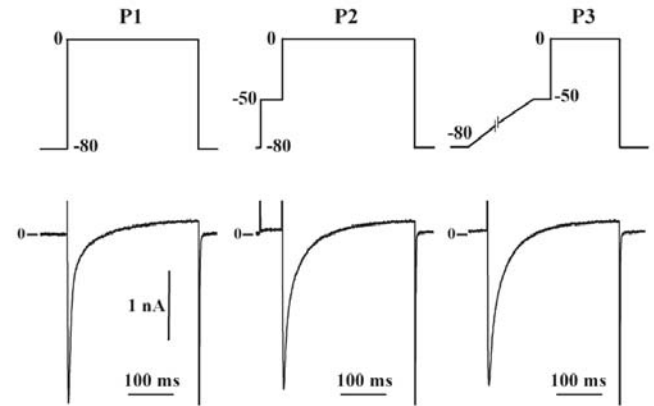


Figure 1. Voltage-clamp protocols. Top: Schemes of the three voltage-clamp protocols used in the present experiments. In all protocols the holding potential was -80 mV. P1: Is the "control" voltage-clamp protocol. From the holding potential, the cardiomyocytes were clamped to 0 mV for 300 ms. In P2, a 50-ms prepulse to -50 mV was applied before clamping the membrane to 0 mV. P3 consisted of a 500-ms ramp from -80 to -50 mV; a 50-ms step to -50 mV and then a 300-ms step to 0 mV. All protocols were applied at 0.25 Hz. Bottom: I_{CaL} currents, activated by the corresponding protocols, in a single cardiomyocyte. Note the significant increase in inactivation time course of I_{CaL} with the prepulses, specially with the P3 protocol.

I_{CaL} was routinely monitored (protocol P1; Figure 1) at 0 mV using 300-ms pulses from a holding potential (HP) of -80 mV and measured as the difference between peak inward current and the current level at the end of the 300-ms pulse. To study the effects of prepulses on I_{CaL} inactivation time course we used two different prepulse protocols to evoke I_{CaL} and compared the results with the routinely applied "P1" protocol already described. With the first prepulse protocol (protocol "P2"; Figure 1), the cell was clamped at a HP of -80 mV, depolarized to -50 mV for 50 ms and then to 0 mV for 300 ms. The second prepulse protocol ("P3"; Figure 1) consisted of a 500-ms ramp from the -80 mV HP to -50 mV, a 100-ms step at this voltage and then a 300-ms step to 0 mV. The three protocols were applied at 0.25 Hz. Values of I_{CaL} density and fast and slow components of I_{CaL} inactivation (τ_{fast} and τ_{slow} , respectively) were obtained after at least ten pulses in each case. Current-to-voltage (I-V) and availability curves were constructed using standard voltage-clamp protocols [22]. Potentials for half availability ($V_{0.5}$) and the corresponding slope factors (s) were obtained after fitting the experimental data to a Boltzmann function:

$$f_{\infty} = (1 + \exp[(V_m - V_{0.5})])^{-1}, \quad (1)$$

using the routines of SciDAVis (GNU/Linux version 0.2.4). In order to estimate how the Ca^{2+} influx into the cell increased with time during a voltage-clamp pulse, I_{CaL} tracings were integrated without taking into account the capacitive transients. This gave us the amount of charge (in pC) entering the cell during the flow of I_{CaL} and was

normalized to C_M . All recordings were done at room temperature (25°C).

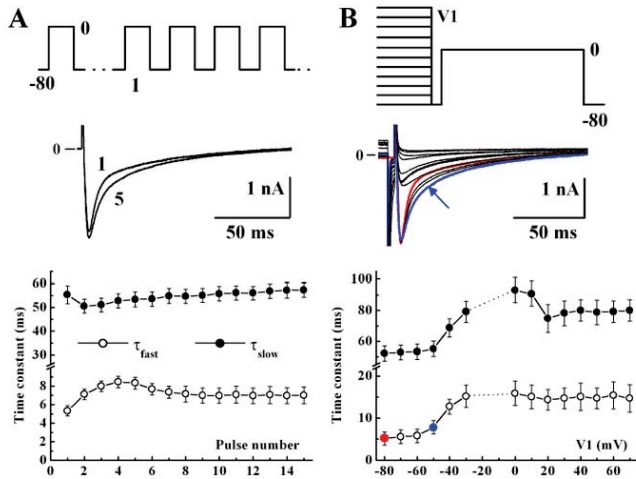


Figure 2. Changes in inactivation time constants of I_{CaL} using different voltage-clamp protocols. A: Pulse-dependent facilitation of I_{CaL} . Top: Scheme of voltage-clamp protocol. The cardiomyocyte was clamped at a holding potential of -80 mV and I_{CaL} was evoked with 300-ms voltage-clamp pulses to 0 mV applied at 0.25 Hz. Stimulation was stopped for 1 min and then restarted at 1 Hz with the same voltage-clamp pulses. Middle: The first and fifth I_{CaL} traces after re-initiation of stimulation are superimposed showing a clear delay in inactivation time course. Bottom: Fast (τ_{fast}) and slow (τ_{slow}) time constants of I_{CaL} inactivation plotted as a function of pulse number after re-initiation of stimulation. Note that while τ_{slow} is barely affected, τ_{fast} is significantly increased between 2nd and 6th pulses over both its value at the first pulse and its steady state value. B: Changes in inactivation time constants of I_{CaL} by prepulses. Top: Scheme of voltage-clamp protocol. The cardiomyocyte was clamped at a holding potential of -80 mV and voltage-clamped with a double pulse (300 ms) voltage protocol. The first pulse (V1) was increased (in 10 mV steps) from -80 to +70 mV and after a 5 ms step at the holding potential, the membrane was clamped to a fixed potential of 0 mV (300ms). Double pulses were applied at 0.125 Hz. Middle: Superimposed I_{CaL} traces recorded at the fixed pulse to 0 mV after the prepulses. I_{CaL} without prepulse and I_{CaL} after a prepulse to -50 mV are marked in red and blue, respectively. Bottom: τ_{fast} and τ_{slow} plotted as a function of prepulse potential (V1). Note that prepulses at -50 and -40 mV which do not activate I_{CaL} induced a marked increase in τ_{fast} .

In order to estimate the number of functional channels (N_f), nonstationary fluctuation analysis of Ca^{2+} current was implemented according to Sigworth [23]. Since I_{CaL} usually shows some rundown (decrease) during the experiment [24] we were forced to select myocytes in which at least 10 consecutive I_{CaL} tracings could be recorded without rundown. The maximal background current variance (σ_B^2) due to a resistor (membrane resistance) was estimated according to:

$$\sigma_B^2 = 4kTB/R_M, \quad (2)$$

where k is the Boltzmann constant, T the temperature, B the bandwidth and R_M the membrane resistance. In our analysis, the maximal background current variance σ_B^2 , was $1.21 \times 10^{-24} A^2$ ($\sigma \sim 1$ pA) taking into account that $T = 25^\circ C$, $B = 3000$ Hz and R_M , estimated from the chord conductance at 0 mV, was not less than 50 M Ω . σ_B^2 was subtracted from measurements before fitting.

The extracellular solution contained (mM): 117 NaCl, 20 CsCl, 10 HEPES, 2 $CaCl_2$, 1.8 $MgCl_2$ and 10 glucose (pH = 7.4). The standard pipette (intracellular) solution contained (mM): 130 CsCl, 0.4 Na_2GTP , 5 Na_2ATP , 5 Na_2 -creatine phosphate, 11 EGTA, 4.7 $CaCl_2$ (free $Ca^{2+} \sim 120$ nM) and 10 HEPES, with pH adjusted to 7.2 with CsOH. In the experiments cells were first let to lie in Petri dishes filled with K^+ -Tyrode solution with 1 mM Ca^{2+} . Cells attached to the micropipette could be positioned on the extremity of each of six microcapillaries (i.d. 250 μm) through which the different extracellular Cs^+ -containing solutions were perfused by gravity (~ 15 $\mu L/min$) allowing rapid changes (~ 1 s) of the extracellular medium. Except TTX, all chemicals were purchased from Sigma-Aldrich Chemical Co (USA).

Results were analyzed using the statistical routines of Gnumeric Spreadsheet for GNU/Linux (Gnome Project, version 1.10.17) and are expressed as means and standard errors of means. Statistical significance was evaluated by means of paired or unpaired Students t test according to the experimental situation. Differences were considered statistically significant for $p < 0.05$.

III RESULTS

In our experimental control conditions, I_{CaL} had a current density of 11.8 ± 0.3 pA/pF and its inactivation time course could be well-fitted to a double exponential with time constants τ_{fast} of 5.1 ± 0.2 ms and τ_{slow} of 55.7 ± 2.2 ms (see also Table 1). The amplitude of fast component comprised 80.6 ± 2.5 % of total I_{CaL} amplitude. Since I_{CaL} facilitation has been related to CDI we first addressed the problem of I_{CaL} inactivation by reproducing two classic experimental protocols in order to demonstrate I_{CaL} facilitation in our experimental conditions (Figure 2 A and B). In the first approach (Figure 2 A), stimulation with protocol P1 (0.25 Hz) was stopped for at least 1 min, it was then reinitiated at a higher rate (1 Hz) and I_{CaL} was recorded until it reached a steady state ($\sim 10 - 15$ pulses). In the second approach (Figure 2 B) I_{CaL} was recorded a stimulation protocol that is commonly used [22, 25] to construct current-to-voltage relationships and availability curves: a fixed pulse to 0 mV was preceded, in 10-mV steps, by prepulses from -80 to +70 mV (0.125 Hz). Figure 2 A clearly shows a frequency-dependent facilitation of I_{CaL} since τ_{fast} was significantly increased at the higher stimulation rate in the first 2 - 6 pulses. However, similar increases in τ_{fast} could be achieved with the second protocol (Figure 2 B). Prepulse potentials at -50 and -40 mV (that did not trigger I_{CaL}) and even prepulses to -30 mV, just at the threshold potential for a tiny I_{CaL} , provoked large increases in τ_{fast} . Contrary to frequency-dependent facilitation, this pulsing protocol also produced large increases in τ_{slow} , however, since previous studies have related τ_{fast} to CDI, we limited our analysis to this fast phase.

We then studied how τ_{fast} could change when prepulses are applied according to the protocols already described in Methods section. In a large number of cells in which the three voltage-clamp protocols could be successively applied,

prepulse protocols P2 and P3 provoked significant increases in τ_{fast} at the fixed test pulse to 0 mV without variations in τ_{slow} . However, the increase in τ_{fast} was significantly greater with the P3 protocol (~43% increase vs ~28% with the P2 protocol). Additionally, the P3 protocol also provoked a small but significant decrease in I_{CaL} density (Table 1). Since neither P2 or P3 protocol produced significant changes in τ_{slow} and the effects of protocol P3 on τ_{fast} were more marked, we focused our subsequent analysis on the effects of this protocol on fast inactivation of I_{CaL} . The increase in τ_{fast} by the ramp protocol P3 was so important that it implied an increase in transported charge of ~30% through the Ca^{2+} channel, from 0.208 ± 0.015 pC/pF to 0.285 ± 0.02 pC/pF ($p < 0.05$), even if peak I_{CaL} density was slightly decreased.

Table 1. Characteristics of I_{CaL} using different voltage-clamp protocols.
* $p < 0.05$ with respect to values obtained with protocol P1. $N = 45$

Protocol	dI_{CaL} (pA/pF)	τ_{fast} (ms)	τ_{slow} (ms)
P1	11.8 ± 0.3	5.1 ± 0.2	55.7 ± 2.2
P2	11.2 ± 0.4	$6.1 \pm 0.3^*$	52.8 ± 2.1
P3	10.1 ± 0.5	$6.8^* \pm 0.5^*$	56.2 ± 3.2

The next step was to study the behavior of τ_{fast} at different test potentials without and with the ramp prepulse as well as the effects of a ramp prepulse on the availability of I_{CaL} . The results are shown in Figure 3 (A and B) and are suggestive of a leftward shift in the voltage dependency of I_{CaL} by the ramp prepulse. This could be confirmed by the leftward shift of the availability curve ($V_{0.5}$) from -21.1 ± 4.3 mV with protocol P1 (no prepulse) to -27.7 ± 3.1 mV with the protocol P3 (ramp prepulse), but without any change in the slope factor s (6.25 ± 3.8 mV vs 6.3 ± 3.1 mV). We next explored whether the ramp prepulse could increase the number of functional Ca^{2+} channels. Although limited to 6 cells in which at least 10 consecutive traces of I_{CaL} showed no rundown, the non stationary fluctuation analysis of I_{CaL} indicated that in these cardiomyocytes the number of Ca^{2+} channels (N_f) activated during I_{CaL} (at 0 mV) was 4867 ± 249 and 4932 ± 222 without and with the ramp prepulse, respectively (not statistically significant; C_M ranged from 165 to 220 pF). These results suggest that prepulses did not increase the number of functional Ca^{2+} channels.

These evidences, together with our previous results showing that τ_{fast} can be “unexpectedly” slowed down by β -adrenergic stimulation, as well as after manipulations not involving CDI (see Introduction), prompted us to study τ_{fast} under different experimental conditions aimed to modify CDI. Table 2 summarizes the steady state values for I_{CaL} density and τ_{fast} in each experimental condition and the results are as follows. The use of Ba^{2+} instead of Ca^{2+} as charge carrier through $Ca_v 1.2$ channels is known to significantly decrease CDI since high affinity sites involved in CDI display a much lower affinity for Ba^{2+} and τ_{fast} is then significantly increased. However, even after this large increase in τ_{fast} ramp prepulses were still able to further increase τ_{fast} . Ryanodine (100 μ M) is a well-known blocker of the sarcoplasmic reticulum (SR) Ca^{2+} channel, so less Ca^{2+}

is released after each voltage-clamp pulse and less Ca^{2+} will be available for CDI mechanisms. This provokes an increase in τ_{fast} which nevertheless could be still increased by the ramp prepulses. Another approach to study this problem is to block the SR Ca^{2+} -ATPase with cyclopiazonic acid (CPA) in an attempt to empty the SR in a pulse-to-pulse manner in order to have less Ca^{2+} from this source available for CDI. After a steady state is reached τ_{fast} is increased but to a lesser extent than with Ba^{2+} or Ryanodine. Again, ramp prepulses were still able to significantly increase τ_{fast} . We then proceeded inversely and in an attempt to increase Ca^{2+} influx and CDI we used the well-known Ca^{2+} channel agonist BayK8644. As expected, BayK8644 markedly increased I_{CaL} density but unexpectedly it showed a tendency to increase τ_{fast} . However, after a ramp prepulse, τ_{fast} was further increased in this experimental condition. Finally, it is well-known that most of the sarcolemmal Ca^{2+} channels lie in the transverse T-tubular system in close association with SR Ca^{2+} channels in the dyads where, due to restricted diffusion, Ca^{2+} concentration can be markedly increased during activation of I_{CaL} . A way to decrease or limit CDI is to break the T-tubules by osmotic shock using formamide leaving intact the Ca^{2+} channels on the surface sarcolemma. As can be seen in Table 2, after formamide treatment I_{CaL} density is markedly decreased and τ_{fast} is significantly increased. In this condition, also, ramp prepulses were able to significantly increase τ_{fast} .

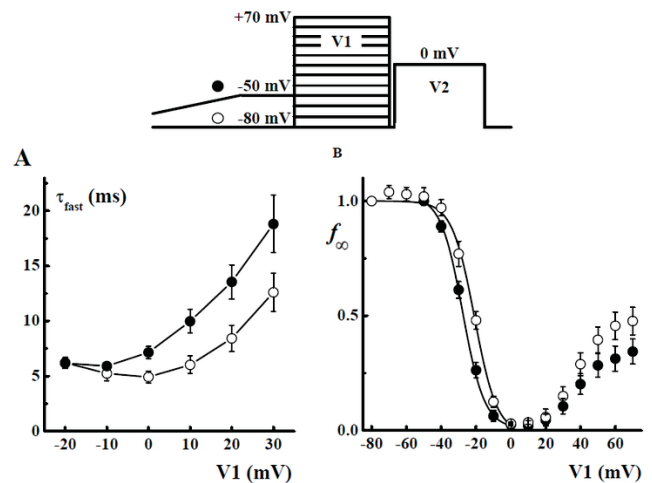


Figure 3. Effects of a ramp prepulse on the inactivation kinetics of I_{CaL} . Top: Scheme of the voltage-clamp protocols used to record I_{CaL} . In a first protocol (○) from a holding potential of -80 mV, 300-ms prepulses (V1) were applied to membrane potentials from -80 to +70 mV in 10 mV steps. After a gap of 5 ms at the holding potential, the membrane was clamped to 0 mV for 300 ms. The second protocol (●) was similar but with a ramp prepulse as defined before. Double pulse rate was 0.125 Hz. A: Voltage-dependency of τ_{fast} of I_{CaL} (at V1). I_{CaL} was recorded at each V1 and its inactivation was fitted to a double exponential. Since, the relationship τ_{slow} vs V1 was not affected by the ramp prepulse, only τ_{fast} is presented. Only recordings between -20 and +30 mV, where I_{CaL} inactivation can be fitted without errors, were used in the analysis. Values were statistically different ($p < 0.05$) between -10 and +30 mV. B: Availability (f_{∞}) curves of I_{CaL} obtained with the two protocols. f_{∞} was obtained by normalizing the I_{CaL} obtained at the fixed V2 (0 mV) after each prepulse (V1) to the maximal (without prepulse) I_{CaL} recorded. Experimental data between -80 and 0 mV were fitted to a Boltzmann function.

Table 2. Effects of a ramp prepulse on I_{CaL} density and fast inactivation time constant (τ_f) under different experimental conditions.

P1 P3	Control	Ba ²⁺	Control	Ryanodine	Control	CPA	Control	BayK8644	Control	Formamide
dI_{CaL} (pA/pF)	11.8±0.8	14.9±1.1 †	10.5±0.4	12.3±0.3 †	11.1±0.6	9.8±0.8	12.1±1.3	24.5±2.5 †	10.5±0.6	5.6±0.5 †
τ_f (ms)	4.8±0.3	16.0±0.6 †	5.0±0.4	16.2±1.5 **	4.7±0.2	5.9±0.5 †	5.7±1.0	6.5±0.3	4.6±0.2	8.5±1.7 †
dI_{CaL111} (pA/pF)	10.2±0.7 *	11.9±0.7 *†	8.9±0.3 *	10.9±0.4 *†	10.0±0.6 *	8.2±0.4 *	10.1±1.0 *	18.0±2.2 *†	9.1±0.5 *	4.6±0.1 *†
τ_f (ms)	6.3±0.5 *	21.0±0.6 *†	6.5±0.3 *	20.5±2.0 *†	6.7±0.6 *	8.2±0.8 *†	7.4±1.0 *	9.2±1.5 *	6.5±0.3 *	11.0±1.3 *†
N	10	10	10	10	6	6	6	6	5	5

* $p < 0.05$ with respect to values with protocol P1. † $p < 0.05$ with respect to its own control.

Note: To record Ba²⁺ currents, extracellular Ca²⁺ was equimolarly substituted by Ba²⁺ (2 mM). Ryanodine: 100 μ M; BayK-8644: 1 μ M; CPA: 30 μ M (cells were incubated for 30 min). Formamide: cardiomyocytes were incubated in 1.5 M formamide for 15 min. For CPA and formamide, controls refer to non-incubated cardiomyocytes from the same dissociation. Control intrapipette solution contained ~ 120 nM Ca²⁺.

IV DISCUSSION

The most important finding of our study is that variations in membrane potential, within the “diastolic” physiological range, slow down the fast phase of I_{CaL} inactivation by a mechanism that is not related to calcium-induced inactivation. This kind of I_{CaL} facilitation by conditioning depolarizations imply an increase in Ca²⁺ entry to the cardiomyocytes and could then contribute to the feedback mechanisms that modulate intracellular Ca²⁺ concentration and signaling. The phenomenon we studied here has been previously described [18] but its underlying mechanism has been considered to be similar to that of the frequency-dependent I_{CaL} facilitation, *i. e.* a decreased CDI due to a reduced SR Ca²⁺ load. However, this interpretation relies on the misconception that the fast phase of I_{CaL} inactivation is solely dependent on a Ca²⁺ release-induced inactivation in a microdomain inaccessible to Ca²⁺ chelators [13,18,26,27] and that this local Ca²⁺ signaling can contribute to 65-75% of inactivation [27,28]. Our results show that, as expected, manipulations aimed to abolish or to strongly decrease CDI increased τ_{fast} but failed to prevent its further increase by depolarizing prepulses. This result suggests that I_{CaL} facilitation by depolarizing prepulses could also have a pure voltage-dependent component in addition to a CDI-related component. However, it is hard to imagine how low depolarizing prepulses could release Ca²⁺ to account for the CDI mechanism. So far, in cardiomyocytes it has never been shown conclusively a voltage-dependent calcium release mechanism. In this regard, the suggestions made by Barre-Lemaire et al., [18] are still waiting for a valid demonstration of a voltage-driven Ca²⁺ release from the SR and the conclusion that this pulse-dependent I_{CaL} and rate-dependent facilitations of I_{CaL} share common mechanisms is no longer valid. The present results are in the same line as those previously published by our group indicating that the fast phase of inactivation of I_{CaL} is not exclusively dependent on CDI.

In the present experiments we made use of several approaches in order to drastically decrease the CDI mechanism at different levels. The use of Ba²⁺ instead of Ca²⁺ as charge carrier is expected to decrease CDI since it is a poor substitute for Ca²⁺ in the CaM site [29]. Additionally, Ba²⁺ permeation should not induce a large Ca²⁺-induced Ca²⁺ release from the SR. Blocking the Ca²⁺ release channel of the SR by Ryanodine should prevent large increases in Ca²⁺ concentration in the restricted junctional spaces in the

vicinity of the Ca²⁺ channel and decrease CDI [30]. On the other hand CPA, a blocker of the SR Ca²⁺ ATPase [30] would promote emptying of the SR with subsequent stimulations and decrease CDI. Finally, T-tubule disruption by formamide, although imperfect, will leave the cardiomyocytes with a population of Ca²⁺ channels essentially expressed in surface sarcolemma where restricted spaces in the vicinity of the channels are less well-developed and thus, with a decreased influence of the CDI mechanism [31]. Although none of these procedures is expected to abolish CDI they could effectively decrease its influence on I_{CaL} inactivation. As could be seen in Table 2, in all these conditions τ_{fast} was significantly increased, as expected from a decreased CDI. However, also in all cases the ramp prepulse protocol could effectively increase τ_{fast} and in magnitudes that were fully comparable to those obtained in control condition where CDI was fully functional. This result strongly suggest that the increase in τ_{fast} by conditioning a prepulse could be more related to a voltage-dependent modulation of Cav 1.2 channel state. The experimental series with BayK8644 seems to confirm this idea. BayK8644 significantly increased I_{CaL} density. This predicts a decrease in τ_{fast} if CDI were the dominant mechanism. However, contrary to this expectation, we found that τ_{fast} was increased. Additionally, ramp prepulses further increased τ_{fast} . The observed leftward shift in $V_{0.5}$ of inactivation by ramp prepulses adds another piece of evidence in favour of a voltage-dependent effect since this shift occurs at membrane potentials where I_{CaL} is not activated by the prepulses. Assuming that the chemical free energy difference between the open and the closed (inactivated or unavailable) is characterized by two parameters: s , the slope factor, and $V_{0.5}$, we might estimate the variation in free energy by introducing a ramp prepulse as follows (see [32]):

$$\Delta G = RT \left[(V_{0.5}/s)_{control} - (V_{0.5}/s)_{prepulse} \right], \quad (3)$$

where R is the gas constant and T the temperature in Kelvin. In our experimental conditions ΔG due to the prepulse was estimated to be 0.995 kcal / mol, which is well in the range of changes in free energy for variations in gating behaviour of Ca²⁺ channels [33]. However, this estimate has the limitation that parameters s and $V_{0.5}$ were obtained from the availability curves and not from the charge (Q) vs membrane potential relationships (see [32]).

Overall, our data suggest that following a prepulse, not activating I_{CaL} , the Ca²⁺ channel delays its inactivation by dwelling a longer time in the open state. A simplified

three-state Markovian model of the fast inactivation phase that considers only voltage-dependent transitions between states could account for our results (Figure 4). Taking advantage of the fitting procedures of the Winascd program we adjusted a three-state model to two selected experimental I_{CaL} traces, one without prepulse and the corresponding trace after a ramp prepulse. The model consisted of a C1 closed state (resting) an open state (O) and a C2 closed state that corresponds to the inactivated state. Values obtained for rate constants between states and steady state probabilities are summarized in Table 3. Best fit results of the fast inactivation phase of current traces to the proposed kinetic scheme suggest that following a prepulse the probability for the channel being open is increased (2.4 times) and even if the probability of the inactivated state C2 is slightly increased (1.24 times), the channel will stay longer in the open state because the rate constant from open to inactivated state is decreased while the rate constant of the inverse transition remains unchanged. The increased probability of the inactivated state is due to an increased rate constant from the closed (C1) state (1.5 x) and a decreased reverse (to C1) rate constant (0.82 x) but with a reduced probability of the channel to be in the closed state. This, however, also favours transition of the channel from the inactivated to open states. Also, the transition from closed to open states is favored since the forward rate constant is increased while the backward rate constant is decreased. As a result, the channel will stay longer in the open state after a prepulse.

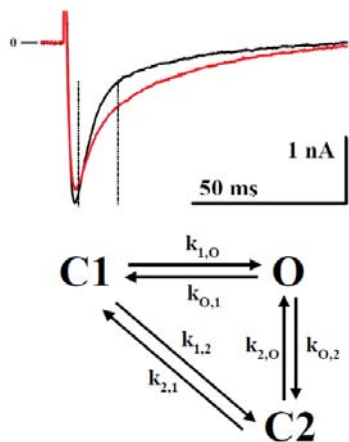


Figure 4. Kinetic scheme of I_{CaL} fast inactivation phase. Top: I_{CaL} traces recorded from the same cardiomyocyte without (black) and with a ramp prepulse (red). The dashed vertical lines indicate the fitted region. In this myocyte τ_{fast} and τ_{slow} were 5.1 and 60 ms without prepulse and 6.8 and 58 ms with the ramp prepulse. Bottom: Markovian three-state kinetic scheme. C1 is the closed (resting) state; O is the open state and C2 corresponds to a closed (inactivated) state of the channel. $k_{x,y}$ are the rate constants (1/s) for the forward and backward transitions between states.

V CONCLUSION

Facilitation of I_{CaL} by depolarizing prepulses below its activation threshold is due to a voltage-dependent mechanism. The increase in τ_{fast} could be explained by a voltage-dependent change in channel transitions that allow the channel to dwell longer in its open state.

Table 3. Results of the kinetic scheme. k Rate Constants (1/s) and P steady state probabilities. The corresponding inactivation time constants of the selected traces were: No PP: $\tau_{fast} = 5.1$ ms and $\tau_{slow} = 60$ ms. PP: $\tau_{fast} = 6.8$ ms and $\tau_{slow} = 58$ ms.

	$k_{0,1}$	$k_{0,2}$	$k_{1,0}$	$k_{1,2}$	$k_{2,0}$	$k_{2,1}$
No PP	0.206	0.261	0.001	0.097	0.134	0.218
PP	0.134	0.144	0.012	0.114	0.137	0.146

	P_0	P_1	P_2
No PP	0.071	0.687	0.242
PP	0.172	0.528	0.300

- [1] J.P. Benitah JP, J.L. Alvarez, A.M. Gómez. J. Mol. Cell. Cardiol. **48**, 26 (2010).
- [2] F. Hofmann, V. Flockerzi, S. J.W. Wegener. Physiol. Rev. **94**, 303 (2014).
- [3] A.L. Hodgkin, A.F. Huxley. J. Physiol. (L) **116**, 497 (1952).
- [4] S. Hering, S. Berjukow, S. Sokolov, et al. J. Physiol. (L) **528**, 237 (2000).
- [5] S.C. Stotz, S.E. Jarvis, G.W. Zamponi. J. Physiol. (L) **554**, 263 (2004).
- [6] G.M. Faber, J. Silva, L. Livshitz, Y. Rudy. Biophys. J. **92**:1522 (2007).
- [7] S. Richard, E. Perrier, J. Fauconnier, et al. Prog. Biophys. Mol. Biol. **90**, 118 (2006).
- [8] B.Z. Peterson, C.D. DeMaria, J.P. Adelman, D.T. Yue. Neuron **22**, 549 (1999).
- [9] T. Cens, M. Rousset, J.P. Leyris, P. Fesquet, P. Charnet. Prog. Biophys. Mol. Biol. **90**, 104 (2006).
- [10] I.E. Dick, M.R. Tadross, H. Liang, L.H. Tay, W. Yang, D.T. Yue. Nature **451**, 830 (2008).
- [11] H. Zhou, K. Yu, K.L. McCoy, A. Lee. J. Biol. Chem. **280**, 29612 (2005).
- [12] J.A. Argibay, R. Fischmeister, H.C. Hartzell. J Physiol. (L) **401**, 2011988.
- [13] C. Delgado, A. Artiles, A.M. Gomez, G. Vassort. J. Mol. Cell. Cardiol. **31**, 1783 (1999).
- [14] I. Findlay, S. Suzuki, S. Murakami, Y. Kurachi. Prog. Biophys. Mol. Biol. **96**, 482 (2008).
- [15] P. Liao, T.F. Yong, M.C. Liang, D.T. Yue, T.W. Soong. Cardiovasc. Res. **68**, 197 (2005).
- [16] J.L. Alvarez, J. Hamplova, A. Hohaus, et al. J. Biol. Chem. **279**, 12456 (2004).
- [17] H. Haase, J.L. Alvarez, D. Petzhhold, et al. FASEB J. **19**, 1969 (2005).
- [18] S. Barre-Lemaire, C. Piot, F. Leclercq, J. Nargeot, S. Richard. Cardiovasc. Res. **47**, 336 (2000).
- [19] D.M. Bers, S. Morotti. Front. Pharmacol. **5**, 1 (2014).
- [20] J. Alvarez-Collazo, C. M. Díaz-García, A. I. López-Medina, G. Vassort, J. L. Alvarez. Pflügers Arch. Eur. J. Physiol. **464**, 459 (2012).
- [21] O.P. Hamill, A. Marty, E. Neher, B. Sakmann, F.J. Sigworth. Pflügers Arch. Eur. J. Physiol. **391**, 85 (1981).
- [22] J.L. Alvarez, E.M. Salinas-Stefanon, G. Orta, et al. Cardiovasc. Res. **63**, 653 (2004).
- [23] F.J. Sigworth. J. Physiol. (L) **307**, 97 (2013).
- [24] T.F. McDonald, S. Pelzer, W. Trautwein, D.J. Pelzer. Physiol. Rev. **74**, 365 (1994).

- [25] J.L. Alvarez, F. Aimond, P. Lorente, G. Vassort. *J. Mol. Cell. Cardiol.* **32**, 1169 (2000).
- [26] K.R. Sipido, G. Callewaert, E. Carmeliet. *Circ.Res.* **76**, 102 (1995).
- [27] S. Adachi-Akahane, L. Cleemann, M. Morad. *J. Gen. Physiol.* **108**, 435 (1996).
- [28] J.S. Sham. *J. Physiol. (L)* **500**, 285 (1997).
- [29] G. Ferreira, J. Yi, E. Ríos, R. Shirokov. *J. Gen. Physiol.* **109**, 449 (1997).
- [30] D.M. Bers. *Cardiac Excitation and Contraction Coupling*. 2nd edition. Kluwer Academic Press (2001).
- [31] F. Brette, L. Sallé, C.H. Orchard. *Circ. Res.* **95**, e1 (2004).
- [32] S. Chowdhury, B. Chanda. *J. Gen. Physiol.* **139**, 3 (2012).
- [33] S. Beyl, K. Depil, Hohaus A, et al. *Pflügers Arch. Eur. J. Physiol.* **464**, 391 (2012).

SIMPLE CELLULAR AUTOMATA TO MIMIC FORAGING ANTS SUBMITTED TO ABDUCTION

AUTOMATA CELULAR SIMPLE PARA IMITAR EL FORRAJE DE HORMIGAS SOMETIDAS A LA ABDUCCIÓN

F. TEJERA[†] AND E. ALTSHULER

Physics Faculty, "Henri Poincaré" Group of Complex Systems, University of Havana, Cuba. ftejera@fisica.uh.cu[†]

[†] corresponding author

Received 11/12/2014; Accepted 11/02/2015

PACS: Dynamics, Ecology, 87.23.-n; Nonlinear dynamics, 05.45.-a; Self-organization, Statistical Physics, 05.65.+b

Modeling complex physical phenomena through computer simulations has become a useful tool for understanding the world around us. Even the simplest realistic models base on the general laws of physics, aimed to solving large systems of partial differentials or integro-differentials equations, and represent exceptional numerical problems. One of the techniques used to address these problems are called Cellular Automata (CA). In brief, they are simulations based on simple rules in which the space, time, and the possible states of the system are discrete [1–3].

Biological systems, especially moving groups of animals, provide many key examples in collective phenomena that can be modeled by CA [4–6]. Most of these collective phenomena show two well defined levels of organization which are the individual level of the organism and the overall level of a group. Most experiments reveal the features of the global level, but determining which individual scale interactions are involved in creating, for example, self-organized patterns, represents a tough challenge [7–10].

Ants belong to the group of animals that organize without centralized control: in fact, they are a paradigm of collective behavior. Living in society involves both cost and benefit. For example, they pay the cost related to the high density of individuals living together in a common space, but they benefit from the access to the information handled by their nest-mates [11]. The high density of ants in a foraging trail results in a decrease in their average velocity and therefore in a decrease in the flow of food returning to the nest. This is due among other things, to the large number of frontal head-encounters that occur between ants moving to and from the food source. These encounters, on the other hand, are expected to contribute to the information exchange between individuals. Since ants are often subjected to numerous threats during foraging (as could be from a predator or adverse weather events such as rain [12–14]), it is reasonable to believe that head-head encounter are crucial to exchange danger information. In the present work we investigate, using CA models, the emergent patterns resulting from different hypothesis of ant-ant exchange of danger information when foragers are abducted.

Our simulations represent an ant colony foraging for food though a trail including ants going from the nest to the foraging area (out-bound ants) and ants returning to the nest from the foraging area (nest-bound ants). During a given time interval ants are abducted with a certain probability at a point in the trail, simulating the presence of a predator. The non-abducted ants just change the direction of motion and move towards the nest carrying the information of danger. In our model, we assume different hypothesis on their ability to share this information with their nest-mates moving to the foraging area. To study how the colony responds to abduction, we analyze what happens to the flow of ants leaving the nest looking for food. We expected that the exchange of danger information between ants would result in a decrease of the number of out-bound ants as a protection mechanism.

As we have mentioned, CA are discretized models, in which the continuous space is replaced by an array of cells. In our case, the size of each cell is such that only an ant can occupy a cell at each instant of time: it corresponds to 2 cm in reality. Ants positions, therefore, may only be changed in discrete steps, that will be integer multiples of the cell size.

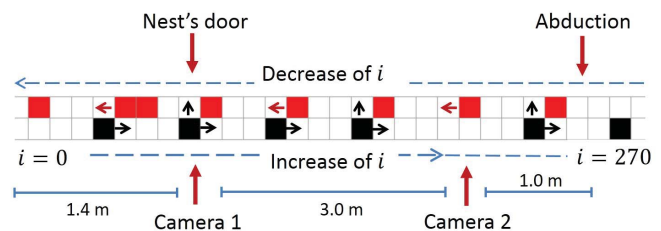


Figure 1. Schematic diagram of the CA foraging trail, including the corresponding dimensions in a realistic experiment. The trail is observed using two cameras. Out-bound-ants and nest-bound ants are represented by black squares and red squares, respectively.

Time is also increased in discrete amounts. In our model, the duration of each step is 1 second. All virtual ants move with constant velocity equal to 2 cm/s. Therefore, the sequence of successive states in our CA, is like a sequence of photographs taken of the entire system.

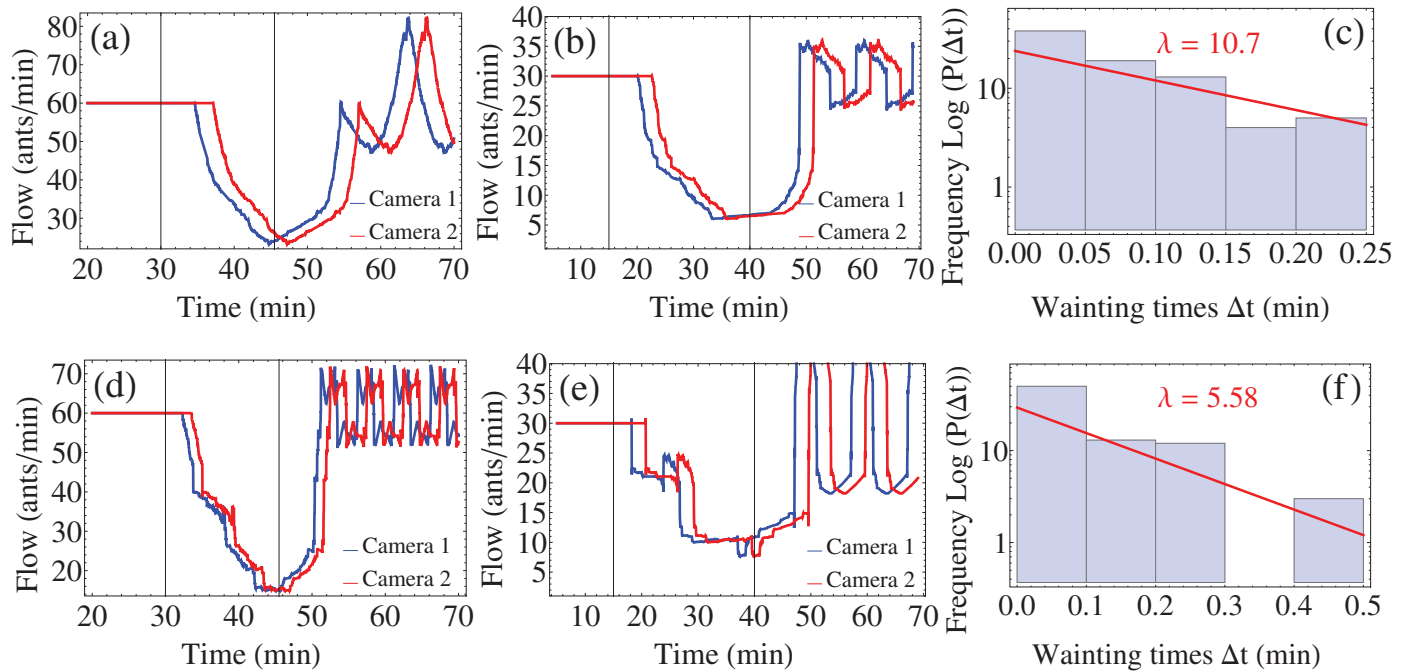


Figure 2. Flows of out-bound ants passing by both cameras and waiting times distributions, simulated by CA. (a) and (d) Flows of out-bound ants passing by both cameras with 15 min of abduction, corresponding to $n_{max}p_{\alpha} = 0$ and $n_{max}p_{\alpha} = 0.8$, respectively. (b) and (e) Flows of out-bound ants passing by both cameras with 25 min of abduction, corresponding to $n_{max}p_{\alpha} = 0$ and $n_{max}p_{\alpha} = 0.8$, respectively. (c) and (f) Waiting times distributions for simulations with 25 min of abduction, corresponding to $n_{max}p_{\alpha} = 0$ and $n_{max}p_{\alpha} = 0.8$, respectively.

The total duration of the simulations is approximately 1 hour, partitioned among before, during and after the kidnapping of ants. We studied two cases resembling actual experiment conditions. In the first the flow of ants is 60 ants/min and individual are kidnapped for 15 minutes (Experiment 1). In the second case the flow is 30 ants/min and ants are kidnapped for 25 minutes (Experiment 2). Ants can move in two directions, toward the food source or back to the nest as shown in Fig. 1. During the time of abduction ants that reach the danger zone can be randomly removed from the line with a probability $P_{ab} = 0.6$. So, for each ant that reaches the area of abduction, a random number (uniformly distributed) between 0 and 1 is generated and compared with the probability of being kidnapped. If:

$$Random(0, 1) > P_{ab}, \quad (1)$$

the ant is kidnapped. Otherwise the ant just reverses its directions of motion and returns to the nest along the top row shown in Fig. 1. As the returning ants reach the nest, they move inside it for some extra distance, change direction, and go out again towards the abduction area (bottom row in Fig. 1). Each abducted ant is accumulated along the top row at the right of the abduction zone, to resemble the laden ants coming from the foraging area that cannot pass through the abduction area. When the abduction period ends, the ants accumulated at the right go back to the nest, thus contributing to the recovery of the flow.

Each line of the simulation contains 270 cells, equivalent to a total of 5.4 meters, divided into three parts between the nest and the area of abduction: over 1.4 m corresponding to the estimate of the length of ants move from the interior of the nest to its door (where camera 1 is located); 3 m

corresponding to the distance between camera 1 and camera 2, and 1 m corresponding to the distance between camera 2 and abduction zone (see Fig. 1). Table 1 summarizes parameters' value used in the simulations.

Table 1. Parameters used in the simulations.

Parameter	Experiment 1	Experiment 2
Abduction time	15 min	25 min
Average ant velocity	$v_h = 2\text{ cm/s}$	$v_h = 2\text{ cm/s}$
Linear density of ants	0.5 ants/cm	0.25 ants/cm
Total number of ants	600	300
Total trail length	5.4 m	5.4 m

All ants returning from the area of abduction during the kidnapping's time, may carry danger information and may transmit it to the out-bound ants. Since there is no experimental evidence on danger information exchange outside the nest, we assume that the ants heading back to the nest from the abduction area, transmit the danger information only inside the nest. As consequence, out-bound ants are induced to perform "U" turns and move back inside the nest if enough danger information is received. Let us assume then that ants share hazard information only within the 1.40 m inside the nest. The status of each ant can be represented as follows:

$$a_n(i, t + 1) \rightarrow F(a_n(i, t)), \quad (2)$$

$$a_o(i, t + 1) \rightarrow F(a_o(i, t), f(n, p_{\alpha}), a_n(i, t)), \quad (3)$$

where $a_n(i, t)$ and $a_o(i, t)$ are the states of occupancy of the position i at time t , by nest-bound and out-bound ants, respectively (a_n and a_o only take the values 0 or 1). F is the "motion function", that we describe as follows. In (2), if

position i (in the upper lane of Fig. 1) is not occupied at time t , the nest-bound ant at the position $i + 1$ moves into i at time steps $t + 1$, but it does not move if the cell i is occupied. In (3), an analogous rule holds along the lower lane, but there is an important difference. If an out-bound ant at position i in the lower lane, coincides with a nest-bound ant in the upper lane, it will increase its "danger information" by adding 1 to the parameter n . This value multiplied by the "panic factor" p_α represents the "survival instinct", and increases as ants meet her companions who survived abduction. If it satisfied that,

$$\text{Random}(0.1) < np_\alpha, \quad (4)$$

ant i in the lower lane will try to jump to the upper lane (equivalent to perform a "U-turn" and return to the nest). This process is included in the function f , in (3). But that is only possible if position i at time t is not occupied in the upper lane. This is why $a_n(i, t)$ is present in (3).

The panic factor p_α , characterizes the intensity of danger information communicated by returning ants. By tuning this factor we can regulate the proportions between the needs to find food and to protect individuals from danger. At the same time p_α is taken in such a way that $0 \leq n_{\max}p_\alpha \leq 1$, to avoid that all ants decide to return after a threshold number of ants encounters. Here, $n_{\max}$ represents the maximum number of contacts that an ant may experiences inside the nest.

We first analyze the extreme case in which the ants do not share information, and therefore never induce U-turns. This is true for $p_\alpha = 0$.

Fig. 2 (a) and (b), show the values for the flow of out-bound ants seen by the two cameras spaced 3 meters apart, corresponding to both kidnapping intervals. We observe that before the abduction period the system is in a stationary state. During abduction the ants flow decreases due to abduction, and afterwards the flow recovers.

These general features are also observed in the case of $n_{\max}p_\alpha = 0.8$, see Fig. 2 (d) and (e). The oscillations found in the flow after abduction period, are due to "avalanche effects": if once an ant is informed of danger and decides to return, it communicates the information to their nest-mates, leading to a multiplicative process.

However, we note the following important differences. The time when the flow begins to decrease once kidnapping begins (τ_{fd}), decreases with increasing $n_{\max}p_\alpha$, as shown in Fig. 3 (a). This suggest that increasing the intensity p_α , ants in the nest learn faster about danger and begin to make U-turns. In fact, this results in a decrease of the number of ants being kidnapping in the abduction area, see Fig. 3 (b).

The simulations show that even although the panic factor is set to the maximum value there is necessary some time (around three minutes) for the danger information to reach the nest. Also, the model as proposed in (2) and (3), does not permit that the colony suppresses completely the flow even for the maximum panic factor (Fig. 2 (d) and (e)), i.e there will always be some "kamikaze" scouts willing to forage. This model gives flexibility to the colony to "prioritize" foraging.

We expect that these two parameters, τ_{fd} and $n_{\max}p_\alpha$, allow direct comparison with experimental data.

Another important quantity that characterizes the traffic on the line of ants is the temporal spacing between ants (or waiting times). This parameter is defined as the difference of passage time between an ant (i) and its nearest nest-mate ($i + 1$): $\Delta t = t_{i+1} - t_i$ and gives us an idea of the ant spatial distribution along the row, during abduction period. The distributions of waiting times for the out-bound ants for the simulations with 25 min of abduction, can be described by a Poisson process, i.e. by exponential distributions $P(t) = e^{-\lambda t}$, as show in Fig 2 (e) and (f). This means that waiting times are mutually independent: there are no correlations between two successive waiting times. During the abduction we reduced the density of ants on the line, so we see longer waiting times for the out-bound ants in the case of maximum panic factor, which is reflected as a smaller slope of the distribution (plotted in a log-linear graph, 2 (e) and (f)). If we increase the panic factor or the time of abduction, there is a decrease in the value of the exponent λ , corresponding to longer waiting times. Fig. 3 (c) shows the decrease of λ as $n_{\max}p_\alpha$ increases. This is also a fingerprint of the mechanism against danger.

Our model shows that the more information is exchanged between members of the colony the bigger will be the response to external stimuli, meaning more protection of their members. But, at the same time shows that the colony does not stop foraging.

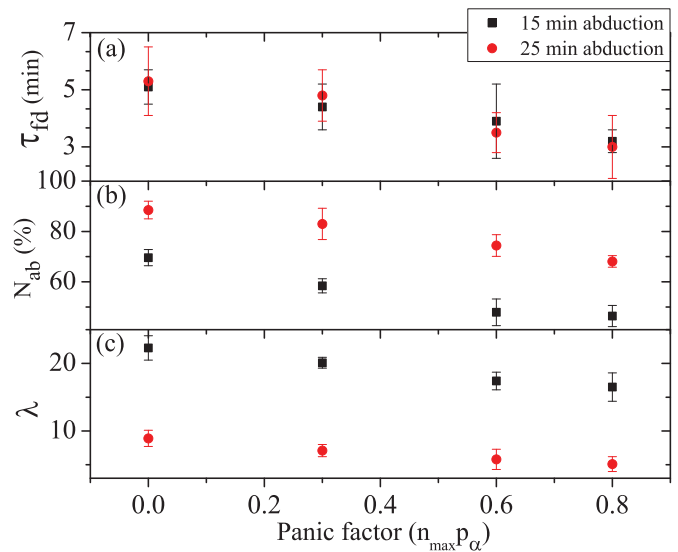


Figure 3. Simulation outputs as a function of the panic parameter. (a) Time delay between the beginning of abduction and start of the flow decrease, τ_{fd} . (b) Percentage of abducted ants, N_{ab} . (c) Exponent of the distributions of waiting times during abduction, λ .

The parameters we have used in the simulations have been estimated for actual experiments under natural conditions. So, it would be easy to test our hypothesis in real experiments. Preliminary experimental results (which will be published elsewhere) suggest that the behavior of foraging ants of species *Atta insularis* is best described using the hypothesis $p_\alpha = 0$. So, surprisingly enough, real ants do not share danger information in abduction experiment.

- [1] J. Von Neumann, *Theory of Self-Reproducing Automata* (University Press, 1966) p. 321
- [2] S. Wolfram, *Cellular Automata and Complexity* (Addison Wesley, 1994) ISBN 0201627167, p. 596
- [3] S. Bandini, S. Manzoni, H. Umeo, and G. Vizzari, *Cellular Automata* (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2010) ISBN 0302-9743, p. 423
- [4] B. Ermentrout and L. Edelstein-Keshet, *J. Theor. Biol.* **160**, 97 (1993)
- [5] B. J. Cole and D. Cheshire, *Am. Nat.* **148**, 1 (1996)
- [6] A. John, A. Schadschneider, D. Chowdhury, and K. Nishinari, *J. Theor. Biol.* **231**, 279 (2004)
- [7] E. Altshuler, O. Ramos, Y. Núñez, A. Batista-Leyva, and C. Noda, *Am. Nat.* **166**, 643 (2005)
- [8] C. Noda, J. Fernández, C. Pérez-Penichet, and E. Altshuler, *Rev. Sci. Inst.* **77**, 126102 (2006)
- [9] A. John, A. Schadschneider, D. Chowdhury, and K. Nishinari, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 108001 (2009)
- [10] S. C. Nicolis, J. Fernández, C. Pérez-Penichet, C. Noda, F. Tejera, O. Ramos, D. J. T. Sumpter, and E. Altshuler, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 268104 (2013)
- [11] D. E. Jackson and F. L. W. Ratnieks, *Curr. Biol.* **16**, 570 (2004)
- [12] A. G. Farji-Brener, S. Amador-Vargas, F. Chinchilla, S. Escobar, and S. Cabrera, *Anim. Behav.* **79**, 343 (2010)
- [13] B. Prabhakar, K. N. Dektar, and D. M. Gordon, *PLoS Comp. Biol.* **8**, e1002670 (2012)
- [14] J. D. Halley and M. A. Elgar, *Aus. J. Zool.* **49**, 59 (2001)

ON THE PENETRATION AND TRAPPING OF THE MAGNETIC FLUX IN Bi-2223 SUPERCONDUCTORS

SOBRE LA PENETRACIÓN Y ATRAPAMIENTO DEL FLUJO MAGNÉTICO EN SUPERCONDUCTORES DE Bi-2223

P. MUNÉ^{a†}, M. HERNÁNDEZ-WOLPEZ^{b×}, A. CRUZ-GARCÍA^{a†}, AND R. J. JARDIM^{c*}

a) Departamento de Física, Universidad de Oriente, Patricio Lumumba s/n, P.O. Box 90500. mune@cnt.uo.edu.cu[†], acruz@cnt.uo.edu.cu[†]

b) Departamento de Física de la Universidad de Camagüey, Ctra. Circunvalación Norte, Km 5 $\frac{1}{2}$. manuel.hwolpez@reduc.edu.cu[×]

c) Instituto de Física, Universidad de Sao Paulo, C. P. 66328, 05315-970, Brasil. rjardim@if.usp.br^{*}

[†] corresponding author

Received 26/02/2015; Accepted 27/05/2015

PACS: Transport properties, 74.25.F; Bi-based cuprates, 74.72.Hs; Magnetization curves, 75.60.Ej; Critical fields, 74.25.Op.

Characterizing different coexisting superconducting levels in granular samples continues to be an important experimental task in fundamental and applied studies of superconductivity. The measurement of lower critical fields is one of the main aspects of this characterization. Some authors have reported measurements of lower critical fields at different temperature in Bi-2223/Ag tapes. They found that the intergranular lower critical field in perpendicular direction to the c axis is approximately 8 Oe at 77 K [1]. On the other hand, measurements in Bi-2223 powder samples reveal values of the lower critical field between 80 and 100 Oe at the same temperature [2,3]. In this case, the estimation of the lower critical field was performed following a graphic method. For this purpose, the deviation of the magnetization curve as a function of the applied magnetic field, $M(H_a)$, from its quasi-linear behavior was considered. Fittings of this curve by using the Bean model [4] have also been reported with similar results [3].

In this paper we compare the results obtained from the normalized $dM(H_a)/dH_a$ curve of a powder sample with those related to the transport flux-trapping curve [5] measured in a pellet sample of the same material compacted at low pressure (< 300 MPa) before the last sintering. A close relationship between both processes, penetration and trapping of the magnetic flux, has been observed even when these occur in powder and pellet samples, respectively.

Samples of Bi-2223 were elaborated following the preparation route described elsewhere [3]. The starting composition was $\text{Bi}_{1.35}\text{Pb}_{0.35}\text{Sr}_2\text{Ca}_{2.5}\text{Cu}_{3.5}\text{O}_y$ and the final compacting pressure 298 MPa. From the same pellet two types of samples were extracted: powder and slab for the measurements of $M(H_a)$ and flux- trapping curves, respectively. A piece of pellet was manually milled during 15 minutes to obtain the powder sample. X-ray diffraction patterns revealed the presence of a small percentage of the 2212 phase ($< 10\%$). The critical temperature of this phase resulted to be < 70 K. It was determined by the peak observed in the first derivative of the magnetization versus

temperature curve, $M(T)$, measured in the powder sample.

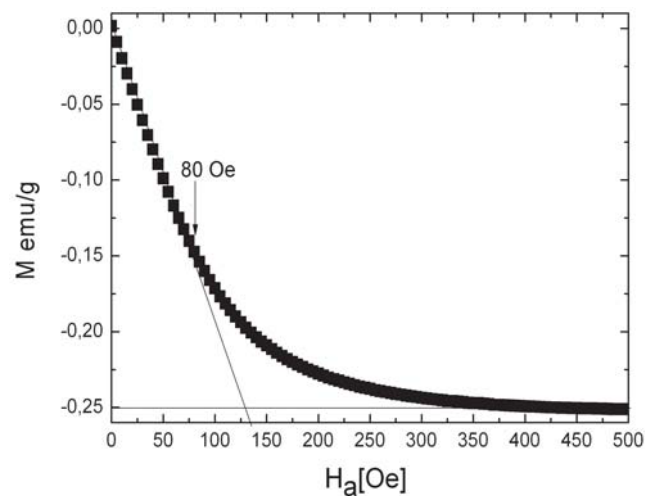


Figure 1. $M(H_a)$ curve of the powder sample. The continuous lines visualize saturation and quasi-linear regions.

Magnetization measurements under low applied magnetic fields were performed by using a commercial Quantum Design SQUID magnetometer. In this experiment the powder sample was cooled in zero applied magnetic field, from room temperature down to 77 K. After that, the applied magnetic field, H_a , was then increased from 0 to 500 Oe, in steps of 5 Oe and the magnetization was measured for each value of H_a . On the other hand, measurements of the critical current density as a function of the maximum applied magnetic field, $J_c(0, H_{am})$, were performed using the standard dc four-probe technique in a slab with typical dimensions of $d = 0.5$ mm (thickness), $w = 2$ mm (width) and $l = 10$ mm (length). The sample was cooled in the same conditions as described above. Afterwards, a certain value of maximum magnetic field, H_{am} , was applied to the sample for approximately 30 s, after which it was reduced to zero again, and the critical current density was determined by using the criterion of $1 \mu\text{V}$. Finally, the sample was warmed up to temperatures higher than the superconducting critical

temperature in order to erase its magnetic “memory” and then cooled down again to 77 K in zero applied magnetic field. By repeating these steps for different values of H_{am} , the flux-trapping curve, $J_c(0, H_{am})$, was built [5].

In Fig. 1 the $M(H_a)$ curve of the powder sample is shown. It reveals a quasi-linear behavior in the interval $0 < H_a < 80$ Oe apparently related to the Meissner state of the grains in the powder sample. The curve exhibits also a Bean-like behavior [4] within the range of applied magnetic field. In order to analyze in details the flux penetration process of the grains we have also plotted the normalized $dM(H_a)/dH_a$ curve. The derivative at a point is computed by taking the average of the slopes between the point and its two closest neighbors. The result is shown in Fig. 2(a).

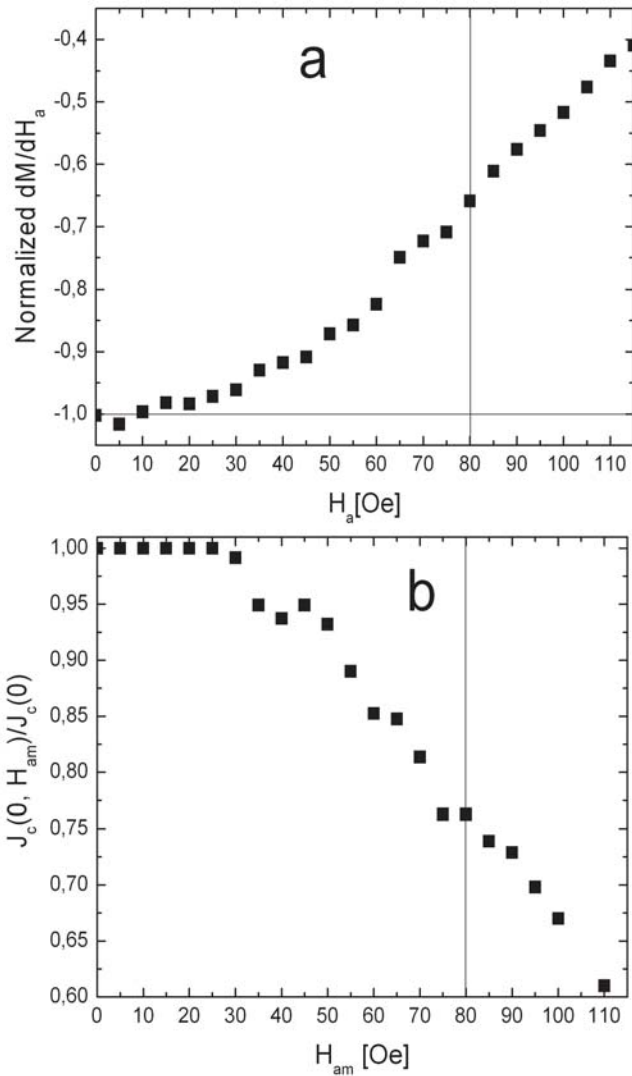


Figure 2. a) Normalized dM/dH_a as a function of applied magnetic field of the powder sample. For the interval $0 < H_a < 90$ Oe the experimental error does not exceed 5%. b) Flux-trapping curve of the pellet sample. The continuous horizontal and vertical lines visualize the value of normalized dM/dH_a at $B_a=0$ and the value of the applied magnetic field of 80 Oe, respectively.

Notice that for $30 < H_a < 80$ Oe the dependence shows several steps, but its increase is more uniform for $H_a > 80$ Oe. A similar behavior is observed in the flux-trapping curve, which is displayed in Fig. 2(b). These results show that

the penetration and trapping flux processes in powder and pellet samples respectively are closely related. Thus, the main cause of the $J_c(0, H_{am})$ dependence must be linked to the intragranular trapped flux, contrary to the concept of cluster described elsewhere [2, 3]. In addition to that, the experimental results of Fig. 2 can be summarized as follows:

1. For $H_a < 30$ Oe the magnetic flux effects in both curves of Fig. 2, can be disregarded.
2. For $30 < H_a < 80$ Oe two processes may occur: a) the grains are penetrated in defects located in the boundaries between two crystals of the same grain [6], b) the existence of different demagnetization factors and orientation angles of the grains in the magnetic field is reflected in the normalized $dM(H_a)/dH_a$ curve as a distribution of the lower critical fields of the sample.
3. For $H_a > 80$ Oe most of the grains start to be penetrated inside the crystals.

The discontinuing growth of the normalized $dM(H_a)/dH_a$ curve in the second interval may suggest the penetration of the magnetic flux into planar defects of the grains. For certain values of applied magnetic field these defects are penetrated depending on their misorientation angles [6] and their orientations respect to the intergranular magnetic field. Such a penetration provokes a jump in normalized $dM(H_a)/dH_a$ dependence. It happens because in the planar defects the magnetic flux penetration is confined into the defect area of order $2\lambda L$. Here, L and λ represent the length of the planar defect and the London penetration depth, respectively. For higher values of H_a , the magnetic flux penetrates into the crystals, the $M(H_a)$ curve follows the Bean model and the increase of its slope is continuous as can be observed in both curves for $H_a > 80$ Oe.

This hypothesis might be experimentally verified observing the microstructure of the powder particles or studying the $M(H_a)$ dependence at different temperatures. A detailed study of the grain size distribution in both, powder and pellet samples, could also contribute to the understanding of this phenomenon. Since the demagnetization factors of the grains are involved in the process, their estimation is also important to determine which one of the two elements considered in the second aspect of our process description has more influence in the behavior of the samples.

To summarize, we suggest the existence of a significant link between the magnetic flux penetration in a powder sample of Bi-2223 and the transport flux-trapping curve measured in a pellet of the same material. This result reveals that the magnetic flux trapping in ceramic samples compacted at low pressures is essentially an intragranular phenomenon. Although the tentative explanation on the penetration and trapping of the magnetic flux is based on the experimental results obtained in two samples of the same material, we have repeated these experiments for several Bi-2223 samples and the results have been similar for pellets

compacted at low pressure. To determine the true nature of the trapped magnetic flux in the range of applied magnetic field of $30 < H_a < 80$ Oe and also evaluate the anisotropic magnetic behavior of the Bi-2223 grains, more experiments are necessary.

Acknowledgements

This work have been supported by the Brazil's agency CAPES under Grant CAPES/ MES No.104/10

- [1] M. Majoroš, L. Martini, and S. Zainella, *Physica C* **282**, 2205 (1997)
- [2] E. Govea-Alcaide, R. F. Jardim, and P. Muné, *Physica C* **423**, 152 (2005)
- [3] P. Muné, E. Govea-Alcaide, and R. F. Jardim, *Physica C* **384**, 491 (2003)
- [4] C. P. Bean, *Rev. Mod. Phys.* **36**, 31 (1964)
- [5] E. Altshuler, S. García, and J. Barroso, *Physica C* **177**, 61 (1991)
- [6] A. Gurevich, *Phys. Rev B* **46**, 3187 (1992)

ENTROPIC FACTOR AS A POTENTIAL MOLECULAR DESCRIPTOR

FACTOR ENTRÓPICO, UN DESCRIPTOR MOLECULAR POTENCIAL

YOANA PÉREZ-BADELL^{a,b} AND JOSÉ MANUEL NIETO-VILLAR^{a†}a) Departamento de Química-Física, Cátedra Química "M.V. Lomonosov", Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana 10400 Cuba. nieto@fq.uh.cu[†]

b) Laboratorio de Química Computacional y Teórica, Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana 10400 Cuba.

[†] corresponding author

Received 24/03/2015; Accepted 01/06/2015

PACS: Entropy thermodynamics, 05.70.-a; Mixing fluids, 47.51.+a; Molecular structure, 33.15.-e.

The molecular descriptor is the final result of a logic and mathematical procedure which transforms chemical information encoded within a symbolic representation of a molecule into a useful number or the result of some standardized experiment [1].

In this context, it is well known that many compounds show their active properties in solution. Nowadays, the development of molecular descriptors that take into account the effect of the solvent and the molecular properties of the compounds is essential in order to better determine the behavior in physiological systems.

Thermodynamics offers a formal framework for the development of molecular descriptors. For example, a set of molecular descriptors, based on Shannon entropy have been established: Shannon entropy (SE) [2], Differential Shannon entropy (DSE) [3–5], Shannon entropy descriptors (SHED) [6], extension of the Shannon entropy (DSE) [7] and a Mutual Conditional and Joint Entropy [8].

The aim of this communication is to develop a thermodynamic formalism to obtain a molecular descriptor that reflects the effect of the solvent based on the entropy of mixing.

In an ideal solution, the entropy of mixing [9] is given as:

$$\Delta S_M = -R \{n_1 \ln x_1 + n_2 \ln x_2\}, \quad (1)$$

where x_1 , x_2 represent the molar fractions of solvent and solute respectively.

In terms of molality m [10], Equation (1) may be rewritten as:

$$\Delta S_M = -R \left\{ \frac{10^3}{MM_1} \ln x_1 + m \ln x_2 \right\}, \quad (2)$$

where molar fractions are given by:

$$x_1 = \frac{n_1}{n_T} = \frac{\frac{10^3}{MM_1}}{\frac{10^3}{MM_1} + m} = \frac{k_1}{k_1 + m},$$

$$k_1 \gg m \therefore x_1 \cong 1,$$

$$x_2 = \frac{n_2}{n_T} = \frac{m}{k_1 + m} \cong \frac{m}{k_1}.$$

Substituting Equation (3) into (2), we obtain:

$$\Delta S_M = -R \left\{ m \ln \frac{m}{k_1} \right\} = -R \{m \ln m - m \ln k_1\}. \quad (4)$$

Note that expression (4) depends only on the molality of the solution.

An expression that takes into account the characteristics of the solute can be reached by the introduction of volume fractions ϕ_i , instead of molar fractions. Then, substitution into Equation (1) leads to the following:

$$\Delta S_M = -R \{n_1 \ln \phi_1 + n_2 \ln \phi_2\}, \quad (5)$$

where ϕ_1 y ϕ_2 are given as:

$$\phi_1 = \frac{\bar{V}_1}{V}, \quad (6)$$

$$\phi_2 = \frac{\bar{V}_2}{V},$$

and $\bar{V}_1$, $\bar{V}_2$ denote the partial molar volumes [10] of solvent and solute, respectively. In order to take into account the molality, Equation (5) becomes:

$$\Delta S_M = -R \left\{ \frac{10^3}{MM_1} \ln \phi_1 + m \ln \phi_2 \right\} \quad (7)$$

Notice that equation (7) is given in terms of the volume fractions of solvent and solute respectively. In addition, for a dilute solution, Equation (7) as a function of the apparent molal volume φ_V [10] is given by:

$$\Delta S_M \approx -R \left\{ \frac{10^3}{MM_1} \ln \frac{V_1^0}{V} + m \ln \frac{\varphi_V}{V} \right\} \quad (8)$$

which can be rewritten as:

$$\Delta S_M = A + \Psi m \quad (9)$$

(3) where A represents a constant, and a set of *entropic factors* (Ψ) characterizes the nature of the solute's interactions in solution. It represents a molecular descriptor.

Table 1. Van der Waals volume and entropic factor values as molecular descriptors used in the regression analysis.

N-acetylamino acid amides and oligopeptides	Molecular Formula	Van der Waals volume V_{vdW} in gas phase ($\text{\AA}^3$)	Entropic factor in aqueous solution Ψ
1. Glycine	$\text{C}_2\text{H}_5\text{NO}_2$	64.34	25.89303
2. Alanine	$\text{C}_3\text{H}_7\text{NO}_2$	81.33	23.14610
3. Serine	$\text{C}_3\text{H}_7\text{NO}_3$	88.14	23.21448
4. Acetylglycinamide	$\text{C}_4\text{H}_8\text{N}_2\text{O}_2$	103.98	19.97569
5. Threonine	$\text{C}_4\text{H}_9\text{NO}_3$	105.00	21.22885
6. Glycylglycine	$\text{C}_4\text{H}_8\text{N}_2\text{O}_3$	110.73	21.26559
7. Acetylalaninamide	$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{N}_2\text{O}_2$	121.14	18.52713
8. Alanylglycine	$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{N}_2\text{O}_3$	127.81	19.59172
9. Histidine	$\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_3\text{O}_2$	134.86	19.10213
10. Acetylvalinamide	$\text{C}_7\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O}_2$	154.26	16.46126
11. Alanylglycylglycine	$\text{C}_7\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4$	174.09	16.87439
12. Tetraglycine	$\text{C}_8\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_5$	203.19	14.61049
13. Pentaglycine	$\text{C}_{10}\text{H}_{17}\text{N}_5\text{O}_6$	249.64	14.19300

Our approach has been tested on a set of thirteen different *N*-acetylamine acid amides and oligopeptides in aqueous solution. The experimental values of apparent molal volumes (φ_V) for different molalities (m) were taken from the literature [11, 12].

The van der Waals volume, that reflects the geometrical structure, is considered as a surface descriptor (V_{vdW}) [13]. Moreover, there is a strong dependence between the surface of the solute molecule and the solvation free energy [14].

V_{vdW} was determined by using fully optimized geometries based on Møller-Plesset second-order perturbation theory (MP2) [15] at the 6-31G (d) basis set level, using the Gaussian 09 program package [16].

Van der Waals molecular volume calculations were based on a grid method derived by Bodor *et al.* [17], using the atomic radii of Gavezzotti [18], included in HyperChem version 7.0 package [19]. Calculated properties of the molecules are shown in Table 1.

It shows how the *entropic factor* (Ψ) is sensitive with the *N*-acetylamine acid amides and oligopeptides in aqueous solution. Furthermore, Figure 1 presents the log-log plots of dependence between the entropic factor (Ψ) and the van der Waals volume (V_{vdW}) for the studied molecules. A power-law type dependence [20, 21] among molecular descriptors was found.

The correlation between both descriptors is expressed by the following relationship:

$$\Psi = \frac{k}{(V_{vdW})^\alpha} \quad (10)$$

An excellent correspondence between both descriptors is achieved. The linear fit $\ln \Psi = \ln k - \alpha \ln V_{vdW}$ was obtained

for $\ln k = 5.20$ and $\alpha = 0.5$.

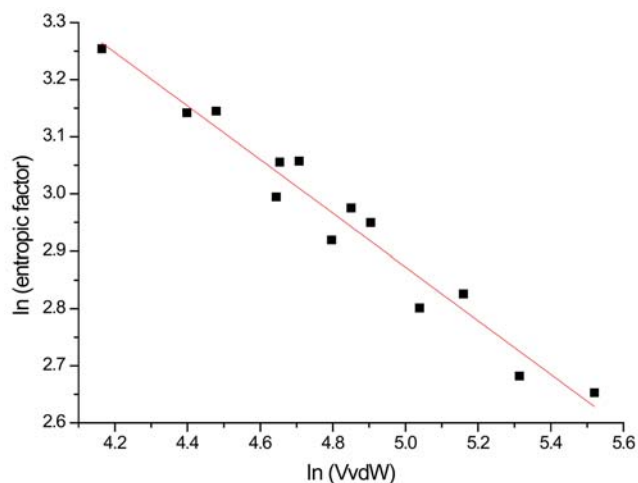


Figure 1. Power-law plot of the logarithm of entropic factor Ψ vs. logarithm of van der Waals volume V_{vdW} for thirteen different *N*-acetylamine acid amides and oligopeptides in aqueous solution.

In conclusion, the entropic factor (Ψ), as a novel set of molecular descriptors based on the thermodynamics formalism of the entropy of mixing, was introduced. The approach has been tested on thirteen different *N*-acetylamine acid amides and oligopeptides in aqueous solution. High power-law type correlation between the entropic factor (Ψ) and the van der Waals volume (V_{vdW}) was observed, supporting the validation of the entropic factor as a molecular descriptor.

We thank Prof. Dr. A. Alzola *in memoriam*. Drs. C. Peniche, C. Perez and L.A. Montero for comments and suggestions. We acknowledge the Spanish Agency for International Cooperation for Development (AECID) for providing the resources that were used in the calculations. Finally, we thank the anonymous reviewers for their helpful comments and interesting suggestions.

- [1] R. Todeschini and V. Consonni, Handbook of Molecular Descriptors, (Wiley-VCH Verlag GmbH: Weinheim, Germany, 2000).
- [2] C. E. Shannon, Bell Syst. Technol. J. **27**, 379 (1948).

- [3] J. W. Godden, F. L. Stahura, J. Bajorath, J. Chem. Inf. Comput. Sci. **40**, 796 (2000).
- [4] J. W. Godden, J. Bajorath, J. Chem. Inf. Comput. Sci. **41**, 1060 (2001).
- [5] J. W. Godden, J. Bajorath, J. Chem. Inf. Comput. Sci. **42**, 87 (2002).
- [6] E. Gregori-Puigjané, J. Mestres, J. Chem. Inf. Model. **46**, 1615 (2006).
- [7] J. Batista, J. Bajorath, J. Chem. Inf. Model. **47**, 59 (2007).
- [8] J. Barigye Stephen, *et al.*, J. Comput. Chem. **34**, 259 (2013).
- [9] J. W. Gibbs, *Scientific Papers, Thermodynamics*, Vol. I, (Longmans Green: New York, 1906).
- [10] R. Quintana González, L. Giraldo Gutiérrez, J. C. Moreno Piraján and J. M. Nieto-Villar, *Termodinámica* (ed. Uniandes, 2005).
- [11] A. W. Hakin, G.R. Hedwing, Phys. Chem. Chem. Phys. **2**, 1795 (2000).
- [12] A. W. Hakin, H. Høiland, G. R. Hedwing, Phys. Chem. Chem. Phys. **2**, 4850 (2000).
- [13] Y. H. Zhao, M. H. Abraham, A. M. Zissimos, J. Org. Chem. **68**, 7368 (2003).
- [14] R. S. Pearlman, *Molecular Surface Area and Volume. In Partition Coefficient Determination and Estimation*, (Pergamon Press: New York, 1986).
- [15] C. Møller, M. S. Plesset, Phys. Rev. A **46**, 618, (1934).
- [16] M. J. Frisch, *et al.*, Gaussian 09, Revision A.01, Gaussian, Inc., Wallingford CT, (2009).
- [17] N. Bodor, Z. Gabanyi, C. K. Wong, J. Am. Chem. Soc. **111**, 3783, (1989).
- [18] A. Gavezzotti, J. Am. Chem. Soc. **105**, 5220, (1983).
- [19] HyperchemTM Release 7.0 for Windows, Molecular Modeling System, (Hypercube, Inc. 2002).
- [20] G. Nicolis, C. Nicolis, *Foundations of complex systems, Nonlinear Dynamics, Statistical Physics, Information and Prediction* (World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2007).
- [21] N. Boccara, *Modeling Complex Systems* (Springer-Verlag New York, Inc., 2004).

DECLARACIÓN DE LA SCF POR EL AÑO INTERNACIONAL DE LA LUZ

La Sociedad Cubana de Física (SCF) hace suya la proclamación de la Asamblea General de las Naciones Unidas de señalar al 2015 como Año Internacional de la Luz y las Tecnologías Basadas en la Luz, y refleja en nuestro país el propósito declarado por la Organización de las Naciones Unidas para la Educación, la Ciencia y la Cultura (UNESCO), de aprovechar esta oportunidad para destacar la continuidad de los descubrimientos científicos en los diferentes contextos haciendo énfasis especial en la promoción de la enseñanza de las ciencias fundamentales.

La designación del 2015 como Año Internacional de la Luz obedece a la feliz coincidencia, en este año, de los aniversarios de varios hitos relacionados con la luz que se remontan a 1000, 200, 150, 100 y 50 años. En 1815, en Francia, Fresnel expuso la teoría del carácter ondulatorio de la luz; en 1865, en Inglaterra, Maxwell describió la teoría electromagnética de la luz; en 1915, en Alemania, Einstein desarrolló la teoría de la Relatividad General que confirmó el papel central de la luz en el espacio y en el tiempo; y en 1965, en los Estados Unidos, Penzias y Wilson descubrieron el fondo cósmico de microondas, eco de la creación del universo. Además, en 2015 se cumplirán 1000 años desde que se publicaran los grandes trabajos de Ibn al-Haytham sobre la óptica, en la

Edad de Oro islámica.

En este contexto, la SCF realizará diversas actividades educativas y de divulgación de la cultura científica en todo el país. Entre ellas, el concurso de fotografía científica "CienciArte 2015" donde se podrán presentar imágenes con contenido científico que resalten algún aspecto de la luz como protagonista de diversas actividades humanas. Se realizará también un concurso de diseño de demostraciones o experimentos de óptica, utilizando materiales que estén al alcance de todos. Los detalles de ambos concursos se podrán encontrar en la dirección: <http://www.fisica.uh.cu/scf/index.php/en/>

Por otra parte, del 13 al 16 de mayo, se celebrará en Varadero, el Fourth International Symposium on Strong Electromagnetic Fields and Neutron Stars, dedicado a los 100 Años de la publicación por Einstein de los trabajos que dieron pie a la Teoría de la Relatividad General.

La SCF se propone que en este Año Internacional de la Luz, llegue a todos los cubanos el conocimiento científico sobre la luz.

Junta Directiva de la Sociedad Cubana de Física

OTÓRGASE PREMIO NACIONAL DE FÍSICA 2014 A AUGUSTO GONZÁLEZ

El 21 de enero de 2015 se otorgó, en el Aula Magna de la Universidad de La Habana, el Premio Nacional de Física al Dr. Augusto González, del ICIMAF. Encontrábanse en la Presidencia María Sánchez-Colina, Presidenta de la Sociedad Cubana de Física, Arbelio Pentón, Decano de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana, y Carlos Trallero, Presidente del Centro Latinoamericano de Física (CLAF). Adicionalmente al propio Trallero, en la audiencia se encontraban todos los Premios Nacionales de Física anteriores: Hugo Pérez, Carlos Cabal, Melquiades de Dios, Alejandro Cabo y Elena Vigil, quien tuvo a su cargo la presentación del premio, en calidad de miembro de la Comisión de Selección.

A continuación, Augusto González realizó una presentación de sus resultados científicos durante 34 años de trabajo tras su graduación en la Facultad de Física de la Universidad de La Habana en 1980, de los cuales cerca de la mitad han transcurrido en el extranjero. Haciendo gala de valentía, Augusto hizo especial énfasis en algunos de sus "fracasos" científicos (si así pudieran llamarse), utilizándolos a modo de ejemplos para hacer notar las dificultades por las que los físicos atravesamos al hacer ciencia en nuestro país. Su intervención no quedó ahí, sino que propuso varias iniciativas para revertir esta situación, que ya había puesto en práctica –o intentado poner en práctica– desde su época como Presidente de la Sociedad Cubana de Física. Finalmente,

realizó un recuento de su labor en la interfaz entre la ciencia y el arte.



Entrega del Premio Nacional de Física 2014. Augusto González (de frente a la cámara) recibe el Premio Nacional de Física de las manos de María Sánchez-Colina, Presidenta de la Sociedad Cubana de Física, en el Aula Magna de la Universidad de La Habana, el 21 de enero de 2015. En un segundo plano, se observa a Carlos Trallero, Presidente del Centro Latinoamericano de Física. Aún más lejos, junto al podio, funge como Maestro de Ceremonias Leovildo Diago, profesor de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana. (Foto: E. Altshuler)

En el acto se reconocieron, además, estudiantes y profesores de preuniversitario que han cultivado éxitos en competencias internacionales durante el último año.

E. Altshuler.

EN JULIO COMO EN ENERO

El 17 de julio de 2014 Yúslín González (Facultad de Física, Universidad de La Habana) defendió la tesis de doctorado “Obtención y caracterización de materiales ferro- eléctricos libres de plomo”. El 22 de enero de 2015 hizo lo propio su colega de la Universidad de La Habana Daryel Manreza, con la tesis “Efectos del campo magnético en la Ecuación de Estado y de Estructura de los Objetos Compactos”.



Una defensa “estelar”. El día 22 de enero de 2015 defendió en el ICIMAF su tesis de doctorado “Efectos del campo magnético en la Ecuación de Estado y de Estructura de los Objetos Compactos” Daryel Manreza, profesor de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana. Las oponentes estuvieron a cargo de los doctores Oscar Álvarez (CITMA) y Fernando Guzmán (Instec). Los tutores fueron Aurora Pérez (ICIMAF) y Jorge E. Horvath (USP, Brasil). (Foto: E. Altshuler)

E. Altshuler

UNA FÍSICA MEJOR PARA “PROFES DE PRE”

Con el propósito de contribuir al perfeccionamiento de la enseñanza de la Física en el nivel preuniversitario, la Facultad de Física de la Universidad de la Habana ha realizado el primer Diplomado Física para profesores de Bachillerato, que fue inaugurado el 26 de enero de 2015.

El Diplomado recogió todos los temas de Física incluidos en los actuales programas de estudio a impartir en períodos de una semana cada vez. Junto a las conferencias sobre las diferentes temáticas, se dedicaron sesiones a la resolución de problemas teóricos y experimentales, así como al uso de técnicas computacionales y de otros recursos de actualidad, útiles para la actividad del profesor de Física.

Aunque la participación fue moderada en esta primera edición (cerca de una docena de profesores), la actividad tuvo una gran acogida.



Física para profes de Pre. El 26 de enero de 2015 se inaugura el primer Diplomado de Física para profesores de bachillerato en una locación del IMRE (Univ. de la Habana). De pie, a la izquierda, el Dr. Saúl Larraendi (coordinador del curso) y el Dr. Arbelio Pentón, decano de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana (Foto: E. Altshuler)

E. Altshuler

REGRESÓ WONP-NURT

Del 9 al 13 de febrero de 2015 tuvo lugar en la Sede del Museo de Bellas Artes en nuestra capital la vigésima edición del Simposio sobre Aplicaciones de las Técnicas Nucleares y Conexas en diversas esferas de la sociedad y la ciencia y Taller de Física Nuclear, WONP-NURT 2015.

WONP-NURT estuvo dedicada a la discusión científica de los problemas actuales en diversos campos de la investigación aplicada y fundamental, entre los que se destacaron:

- Física de las radiaciones.
- Sistemas nucleares exóticos.
- Física de las altas energías.
- Técnicas analíticas nucleares.
- Física médica.

- De la escala femto a la nano, incluyendo la biología radiacional.
- Mutación reproductiva en plantas.

El evento WONP-NURT por sus siglas en inglés: “Workshop on Nuclear Physics (WONP)” e “International Symposium on Nuclear and Related Techniques (NURT)” es una actividad de carácter bianual, organizada conjuntamente por el Centro de Aplicaciones Tecnológicas y Desarrollo Nuclear (CEADEN) y el Instituto Superior de Ciencias y Tecnologías Aplicadas (InSTEC), en coordinación con la Agencia de Energía Nuclear y Tecnologías de Avanzada (AENTA) y cuenta con un Comité Científico Internacional integrado por importantes y reconocidas personalidades científicas cubanas y extranjeras en la temática. La Dra. Ana Ester

Cabal del CEADEN (Cuba) presidió el Comité Organizador en esta ocasión.

Se trata de un congreso científico relacionado con las aplicaciones pacíficas de las técnicas nucleares en varios ámbitos de la sociedad cubana, al cual asistieron unas cien personalidades científicas y jóvenes profesionales de 21 importantes entidades nacionales relacionadas con la actividad nuclear, tales como CEADEN, InSTEC, INOR, UCLV, HCQ Hnos Ameijeiras, Univ. de Oriente, ICIMAF,

CEAC, CENTIS, CPHR, IBP-VC, INIVIT, IMRE, INCA, Fruticultura, UCI, Univ. de Artemisa, Univ. de la Habana, Suelos, Planta Irradiación Gamma, CIAC-Camaguey.

Este evento proporcionó una oportunidad única para la comunidad científica cubana, redundando en la formación de los científicos jóvenes, ya que propició el debate sobre los principales y más recientes resultados, teóricos y experimentales.



Participantes en de WONP-NURT 2015. (Foto: Comité Organizador)

La colaboración internacional establecida a partir de dichos encuentros contribuye decisivamente a la sostenibilidad de nuestra actividad científica y su impacto en el desarrollo tecnológico. En la presente edición participaron 38 profesionales de 15 países: Alemania, Austria, Bélgica, Brasil, Canadá, China, España, Francia, Italia, México, Panamá,

Paraguay, Perú, Rusia, y Venezuela.

Dra. Angelina Díaz García

Centro de Aplicaciones Tecnológicas y Desarrollo Nuclear (CEADEN)

LA FÍSICA ESTADÍSTICA AL SERVICIO DE LA SALUD HUMANA



Durante los días del 23 de febrero al 4 de marzo de 2015 tuvo lugar la Escuela de Física Estadística Aplicada a la Biología de Sistemas, organizada por A. Lage y R. Mulet

(Facultad de Física, Universidad de La Habana) y K. García (Centro de Inmunología Molecular), con la colaboración de varios colegas de Italia y Francia. Los días 5 y 6 de marzo tendría lugar el Taller correspondiente, donde participaron 20 científicos estudiantes de postgrado provenientes de Cuba, México, Colombia, Argentina, Italia, Francia, Estados Unidos, Polonia, India y Holanda, entre otros.

Escuela y el Taller se concentraron en la aplicación de los métodos de la Física Estadística a temas con una fuerte incidencia en la salud humana, como las neurociencias, la inmunología, las redes genéticas y la metabólica. El financiamiento fue básicamente provisto por el proyecto Netadis (Marie Curie Action), el Centro de Inmunología Molecular, el ICTP, el CLAF y los laboratorios Elea en Argentina. El proyecto también contó con el apoyo de la embajada de Francia en Cuba.

A. Lage

Facultad de Física, Universidad de La Habana

FÍSICA EN PRIMAVERA

En abril de 2015, Llinersy Uranga –vicedecana de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana– ha recibido el segundo de dos importantes premios por ella obtenidos en los últimos meses sobre la base de su trabajo científico asociado a la modelación mecano-cuántica de sistemas moleculares.

El primero, otorgado el 22 de noviembre de 2014 en Trinidad Tobago, se trata del premio bienal de la academia de ciencias del tercer mundo – Academia de Ciencias del Caribe (TWAS-CAS) a jóvenes investigadores. El segundo, se trata del Premio de Joven Investigador CITMA en la categoría de Ciencias Exactas. En el acto, celebrado en Expo Cuba, participaron la ministra de CITMA, el ministro de Educación Superior, y otras personalidades. Con este *performance*, Llinersy mantiene nuestra tradición de féminas cubanas multi-premiadas en el área de las ciencias físicas.

E. Altshuler



Llinersy Uranga durante el acto de recepción del Premio TWAS-CAS a jóvenes investigadores en Trinidad-Tobago (noviembre de 2014) (Foto: Cortesía del webmaster de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana)

PRÉMIASE LA TERCERA OLIMPIADA NACIONAL UNIVERSITARIA DE FÍSICA

El pasado 13 de mayo de 2015, se anunciaron los premios de la Tercera Olimpiada Nacional Universitaria de Física –que llamaremos por el onomatopéyico acrónimo de ONUF III. Los participantes se vieron enfrentados a problemas resultantes de la febril imaginación de un Comité Académico formado por Osvaldo de Melo Pereira, Héctor Borroto Gutiérrez, Alejandro Borroto Ramírez, Julio Cesar Drake (Universidad de La Habana), y Alejandro Cabo (ICIMAF). De ese trance, salieron especialmente airoso Danyer Pérez (INTEC) [ORO], Ariel Chang (Universidad de La Habana) [BRONCE], Alejandro L. Alfonso (UCLV) [Bronce], José A. Rubiera (INTEC) [BRONCE], William Carreras (UCLV) [BRONCE], Rafael E. Sosa (INTEC) [BRONCE], Eduardo E. García (Universidad de La Habana) [MENCIÓN] y Leonardo Domínguez (Universidad de La Habana) [MENCIÓN].

María Sánchez-Colina y E. Altshuler
Facultad de Física, Universidad de La Habana



Siete de los ocho ganadores de la Tercera Olimpiada Nacional Universitaria de Física. De izquierda a derecha: William Carreras (UCLV) [BRONCE], Rafael E. Sosa (INTEC) [BRONCE], Danyer Pérez (Intec) (ORO), Alejandro L. Alfonso (UCLV) [Bronce], Eduardo E. García (Universidad de La Habana) [MENCIÓN], Leonardo Domínguez (UH) (Mención) y José A. Rubiera (INTEC) [BRONCE] (Foto: María Sánchez-Colina)

CON UN NUDO EN LA GARGANTA

Del 20 al 24 de abril de 2014 se realizó el proceso de acreditación del doctorado en ciencias físicas que comanda la Facultad de Física de la Universidad de La Habana. A pesar de las carencias y la dispersión a causa de la prolongadísima reparación del edificio de Física, se le volvió a conferir al doctorado la categoría de Excelente.

Algo más tarde, del 27 al 30 de abril, la Facultad de Física se enfrentó a un reto aún más complejo: el proceso de acreditación de la carrera (pregrado), que no sufría una evaluación de tal naturaleza desde el año 2004, antes del comienzo de la reparación del edificio. Los representantes de la Junta de Acreditación Nacional quedaron altamente impresionados con el nivel del claustro y de los estudiantes –notablemente, el 100% de ellos aprobó el Examen Integrador que se les aplicó– así como con el extraordinario sentido de

pertenencia de los egresados que fueron entrevistados. Uno de los miembros de la comisión pidió copias de los trabajos de curso de los estudiantes para llevarlos como muestra de un trabajo científico de excelencia a su universidad de origen. Según relata otro de los miembros de la comisión “se le hizo un nudo en la garganta” ante la pasión que demuestran los egresados cuando se habla de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana.

En el momento de la escritura de esta noticia no se tiene aún el veredicto oficial de la Junta de Acreditación Nacional. Pero si hay pasión, estamos salvados. El certificado de excelencia resulta, entonces, un asunto secundario.

Ll. Uranga y E. Altshuler
Facultad de Física, Universidad de La Habana

LA FÍSICA AGRADECE A JUVENTUD TÉCNICA

El pasado 13 de mayo la Sociedad Cubana de Física entregó sendos reconocimientos a la revista Juventud Técnica y a la periodista Daymaris Martínez por su contribución a la divulgación de los resultados de la ciencia, y en particular de la Física, en Cuba.



Juventud Técnica en la Universidad de La Habana, el 13 de mayo de 2015. De izquierda a derecha: Daymaris Martínez, María Sánchez-Colina, e Iramis Porro, directora de Juventud Técnica. (Foto: Cortesía de María Sánchez-Colina)

E. Altshuler

COSMOLOGÍA EN MAYO: STARS Y SMFNS

Entre el 10 y el 16 de Mayo del 2015 se celebraron en Cuba el TERCER SIMPOSIO CARIBEÑO DE COSMOLOGÍA, GRAVITACIÓN, FÍSICA NUCLEAR Y ASTROPARTÍCULAS-STARS2013 y el CUARTO SIMPOSIO INTERNACIONAL DE CAMPOS ELECTROMAGNÉTICOS INTENSOS Y ESTRELLAS DE NEUTRONES SMFNS 2015 (13-16 mayo) en los hoteles NH Capri (Habana) y el Meliá Marina (Varadero), respectivamente.

Los eventos estuvieron organizados por La Sociedad Cubana de Física y el ICIMAF y reunieron a 37 participantes Extranjeros y 12 cubanos. STARS estuvo dedicado a abordar temas generales de cosmología, gravitación y física nuclear. En particular se dedicó el primer día a los 100 Años de las Ecuaciones de la Relatividad General, en el año Internacional de la Luz, con conferencias muy actuales; Cosmología y Relatividad General. El segundo día fue dedicado a los experimentos y observatorios más relevantes que dan cuenta de la física a nivel microscópico (altas energías) y a escala macroscópica: Observatorios Astronómicos. Estuvieron representados el CERN con charlas sobre los últimos resultados de los experimentos ATLAS y CMS y la búsqueda en otras escalas de energías (7TeV) de física exótica, el GSI, FAIR BNL que recreará fases de la materia densa y caliente, así como el experimento de Gran Sasso sobre Física de Neutrinos. Entre los observatorios representados estuvieron el CTA (Cherenkov Telescope Array), el experimento AUGER de rayos cósmicos de altas energías y el observatorio SOFIA de la NASA colocado en un Boeing737 que estudia el medio interestelar. El tercer día del STARS2015 fue dedicado a algunas restricciones que impone las observaciones astrofísicas sobre teorías como las

de Branas, pero además se presentó el proyecto de naves interplanetarias autónomas que usan los pulsares como relojes atómicos prescindiendo de los GPS.

El SMFNS, como es usual, abordó los estudios de los efectos de campos magnéticos en la materia nuclear y las consecuencias a escala macroscópica. Hubo presentaciones observacionales que complementaron los trabajos teóricos y enriquecieron el debate. Como novedad estuvo que se dedicó una sesión a la presentación de trabajos de Astrobiología y Física de la Vida con estudios sobre el papel que juega la radiación ionizante en enfermedades como el cáncer. Se otorgó el premio Albert Einstein al mejor trabajo presentado por un joven investigadora, que fue ganado por Lídice Cruz Rodríguez.

Los congresos tuvieron una participación amplísima de destacados físicos de todo el orbe que representaron las Instituciones más prestigiosas de Brasil, México, Francia, Italia, China, Alemania, USA, Portugal, Israel, Rusia, Portugal, España, Suiza, Polonia, Colombia y Chile. A destacar la presencia de Tsi Piran (Universidad Hebrea Israel), Horst Stoecker (Director del GSI), Joerg Aichelin (Universidad de Nantes), Elena Bratkovskaya (ITP-FIAS Frankfurt), Marcus Bleicher (FIAS Frankfurt), Tomas Boller (Max Planck Institute), Martin Roth (Leibniz Institute for Astrophysics), Tomas Curtright (Universidad de Miami), Nordtvedt Kenneth (Northwest Analysis), Serguei Popov (Universidad de Moscú) y Han Zinnercker (NASA-Ames Silicon Valley), entre otros muchos.

Aurora Pérez
ICIMAF



Convocado por el Departamento de Física Aplicada de la Facultad de Ingeniería Mecánica de la Universidad de Oriente (UO) con el auspicio del Programa VLIR encaminado al fortalecimiento Institucional de la UO para el desarrollo sostenible de la región oriental de Cuba, se celebró el pasado 29 de mayo de 2015 el “II Taller de enseñanza de la Física”, dándole continuidad al primero realizado en mayo del 2014.

Como en la primera versión, participaron profesores e investigadores en el campo de la física de diferentes entidades de la Universidad de Oriente: el propio Departamento de Física Aplicada (DFA) (coordinador de la enseñanza de la Física General en las carreras de Ingeniería), el Departamento de Física de la Facultad de Ciencias Naturales (DF) (coordinador del programa de la Licenciatura en Física) y el Centro de Biofísica Médica (CBM). Pero, en esta segunda versión se incorporaron colegas de la Universidad Pedagógica (UP) “Frank País García” de Santiago de Cuba y de la Filial de Banes de la UP “José de la Luz y Caballero” de Holguín.

La apertura del taller se realizó por el M. Sc. César Mesa Navarro, Jefe de Departamento de Física Aplicada contando con la presencia de la Dra. Martha Mesa Valenciano, Rectora de la Universidad de Oriente, la Dra. Lizette Pérez Martínez, Directora del Centro de Estudios de la Educación Superior “Manuel F. Gran” y el Dr. Yoel Portuondo Paisan, Decano de la Facultad de Ingeniería Mecánica.

La conferencia inaugural “Esquicio histórico de la enseñanza de la Física en Cuba” fue dictada por el M. Sc. Luís Manuel Méndez Pérez, Profesor Titular del Departamento de Física y vicepresidente de la Sociedad Cubana de Física.

Se entregaron diplomas de reconocimiento al Dr. C. Faustino Leonel Repilado Ramírez, el Dr. C. Obel Durruthy Carbonell, el Dr. C. José Raúl Díaz López, el Dr. C. Ulises Mestre Gómez, el Dr. C. Roberto Pérez Rosell, el M. Sc. Luis Rodríguez Landrove, el M. Sc. José Bartolo Palacios Mustelier, la Lic. Luz Del Alba Jardines Montt, el Ing. Félix Cumbá Leyva, el M. Sc. Bonifacio Rey Norma y el Lic. Juan Verdecia Aliaga por su loable labor como profesores o fundadores del Departamento de Física Aplicada. Un reconocimiento especial recibió la Ing. Dallana McPherson Sánchez que, con sus setenta y cinco años de edad, aún se mantiene en activo.

El taller contó con la participación de unos 30 profesores o investigadores, presentándose 18 ponencias distribuidas en dos comisiones que mostraron las experiencias de los participantes en la enseñanza de la Física en sus respectivos centros. El Dr. C. Pedro Demetrio Muné Bandera, coordinador del programa desarrollo de las ciencias básicas en la Universidad de Oriente dentro del proyecto VLIR, disertó sobre su estado actual y las perspectivas hasta y después del 2018, teniendo en cuenta a los demás centros de educación superior de la región oriental de Cuba y que incluirá también a la República Dominicana.

Se convocó a la realización del III Taller en mayo del año próximo, con la perspectiva de extenderlo a la enseñanza preuniversitaria y en el nuevo marco de la Universidad Integrada.

L. M. Méndez Pérez

Departamento de Física, Facultad de Ciencias Naturales,
Universidad de Oriente

APRENDIENDO EN ENSEÑAR, EN HOLGUÍN

La Universidad de Ciencias Pedagógicas “José de la Luz y Caballero”, la Sociedad Cubana de Física y la Sociedad Cubana de Matemática y Computación celebró el “TALLER INTERNACIONAL DE LA ENSEÑANZA Y EL APRENDIZAJE DE LA MATEMÁTICA, LA INFORMÁTICA, LA FÍSICA, LAS CIENCIAS NATURALES Y TÉCNICAS EN EL SIGLO XXI” (FIMAT XXI) los días 19 y 20 de junio de

2015 en la Universidad de Ciencias Pedagógicas de Holguín. En el evento sesionaron los siguientes talleres y simposios: VI Taller Científico Metodológico sobre la Matemática y su Enseñanza, VI Taller Científico Metodológico sobre la Física y su Enseñanza, IV Taller sobre las Ciencias Naturales y su Enseñanza, IV Taller sobre Software, retos y realidades en el siglo XXI, V Simposio de Educación Energética y Ambiental

para el Desarrollo Sostenible y el II Taller de Didáctica de las Ciencias Técnicas y la Pedagogía Profesional

Se desarrollaron conferencias magistrales y especializadas, sesiones científicas en comisiones, comunicaciones breves, talleres, mesas redondas, exposición de trabajos en carteles y presentaciones electrónicas; cursos pre-evento; concursos

sobre medios de enseñanza, carteles, software educativo y de fotografías; además de ferias, subastas, presentación y rifas de libros, todo relacionado con las Ciencias Exactas, Naturales y Técnicas.

Comité Organizador, FIMAT XXI

MATERIA COMPLEJA: MarchCOMeeting'15

Física
www.fisica.un.cu/revista
REVISTA CUBANA DE FÍSICA
"Henri Poincaré"
Group of Complex Systems
Physics Faculty
University of Havana

MarchCOMeeting'15
Complex matter physics:
Active materials, dynamics and patterns
Havana, Cuba, June 24 - 26, 2015

The scope of MarchCOMeeting'15 -June Edition- includes
Active matter, chaos, complex fluids, colloidal systems, microfluidity, flow phenomena, complex materials and pattern formation, biological networks, granular matter, neural dynamics and patterns, avalanche dynamics

Invited speakers
J. Álvarez (Nat. Cardiology Institute, Cuba)
D. Bonn (U. Amsterdam, The Netherlands)
R. Cao Sr. (U. Havana)
R. Cao Jr. (U. Havana)
A. Cornelissen (U. Paris-Diderot, France)
R. Cruz (U. Navarra, Spain)
A. González (ICIMAF, Cuba)
P. Dommersnes (NTNU, Norway)
S. Douady (U. Paris-Diderot, France)
E. Luijten (Northwestern Univ. USA)
D. Maza (U. Navarra, Spain)
E. Moreno (CIM, Cuba)
R. Mulet (U. Havana, Cuba)
F. Pacheco (U. de Puebla, México)
T. Pöschel (U. Erlangen-Nuremberg, Germany)
O. Ramos (U. Lyon, France)
Ch. Scholz (U. Erlangen-Nuremberg, Germany)
O. Sotolongo (U. Havana - UAEM, México)
M. Turner (U. of Warwick, UK)
D. van der Meer (U. of Twente, the Netherlands)

Local organizing committee
Ernesto Altshuler (Univ. Havana)
Oscar Sotolongo (Univ. Havana)
Aldo José Batista-Leyva (Univ. Cuba)
Aramis Rivera (Univ. Havana)
Luis Valdez (Univ. Havana)
Bastar Concepción (Univ. Havana)
Carlos González-Rodríguez (Univ. Havana)
Guertín Quintana (Univ. Havana)

Scientific committee
J. O. Fossum (NTNU, Norway)
E. Altshuler (Univ. Havana, Cuba)
O. Sotolongo (Univ. Havana & U. Cuernavaca, México)
Aramis Rivera (Univ. Havana, Cuba)
A. J. Batista-Leyva (Univ. Cuba)

Round table: ThinkVibrots
In addition to talks, poster session, etc., there will be a round table entitled *ThinkVibrots*, where we will discuss the working principles, possible applications and even artistic connotations of the *Vibrot*, a simple, inexpensive device that converts vibration into rotation. Herds of interacting vibrots constitute, perhaps, a new kind of active matter. A few Cuban undergrad students are expected to present their own views on these matters.

Sponsored by **NTNU**
Norwegian University of Science and Technology

Cartel anunciador del MarchCOMeeting'15.

¿Por qué MarchCOMeeting'15 en el mes de junio? Porque en junio se celebró el evento la *Ciencia de los Materiales en la Era de la Sostenibilidad* (La Habana, 19 de junio – 1 de julio de 2015): a esa actividad se asoció, en calidad de reunión previa, el evento *Complex Matter Physics: Active materials, dynamics and patterns*, MarchCOMeeting'15. Habiéndose creado el acrónimo MarchCOMeeting'12 tras la exitosa primera edición en marzo de 2012, era realmente una pena

cambiarlo por el simple hecho de que esta segunda edición no se haya celebrado en el mismo mes exactamente. Así que lo dejamos.

Presidido por E. Altshuler (Universidad de La Habana) y J. O. Fossum (NTNU, Noruega), MarchCOMeeting'15 se celebró en áreas del Hotel Nacional, del Hotel "Capri" y de la Universidad de La Habana del 24 al 26 de junio de 2015, y contó con la presencia de importantes conferencistas invitados, tanto nacionales como extranjeros: J. Álvarez (Instituto de Cardiología y Cirugía Cardiovascular), D. Bonn (Universidad de Amsterdam, Holanda), R. Cao y R. Cao Jr. (Universidad de La Habana), A. Cornelissen y S. Douady (Universidad Paris-Diderot, Francia), R. Cruz y D. Maza (Universidad de Navarra, España), A. González (ICIMAF), E. Luijten (Northwestern University, USA), E. Moreno (CIM), R. Mulet (Universidad de La Habana), F. Pacheco (Universidad de Puebla, México), T. Pöschel y Ch. Scholz (Universidad de Erlangen-Nuremberg, Alemania), O. Ramos (Université Lyon-1), O. Sotolongo (UAEM, México), M. Turner (Universidad de Warwick) y D. van der Meer (Universidad de Twente, Holanda).

El primer día del evento se dedicó a ponencias sobre la llamada *material activa*: incluyó sistemas bacterianos, insectos sociales, bandadas de pájaros, y partículas de arcilla que actúan cooperativamente. El segundo día, la reunión de sumergió aún más en el terreno de la Biología, incluyendo desde la física estadística del sistema inmune, hasta la morfogénesis de las nervaduras de las hojas de las plantas. El tercer día, se trató fundamentalmente el caso de los medios granulares, incluyendo las dos conferencias finales en el Aula Magna de la Universidad de La Habana, y un breve acto de clausura. Además, se incluyó una mesa redonda sobre los *Vibrots* (dispositivos mecánicos que convierten la vibración en rotación), donde participaron estudiantes de pregrado ganadores de un concurso sobre el tema previamente convocado durante la Jornada Científica Estudiantil de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana, celebrada en el mes de mayo de 2015.

Comité Organizador

CONCURSO NACIONAL DE FOTOARTE CIENTÍFICO CIENCIAARTE 2015

En ocasión y en saludo al 2015, declarado por la UNESCO Año Internacional de la Luz y de las Tecnologías Basadas en la Luz, la Sociedad Cubana de Física y el Comité Territorial Cubano de la Comisión Internacional de Óptica

(ICO) convocan a participar en el Concurso de FotoArte Científico CienciaArte 2015. CienciaArte 2015 es un concurso de fotografía científica cuyo objetivo es acercar y divulgar la ciencia y la tecnología a la población mediante una

visión artística y estética a través de imágenes con contenido científico y tecnológico y la información brindada sobre ellas.

Reglas del Concurso:

1. Las imágenes se presentarán en una de las dos categorías siguientes:

- *Distinguiendo el micromundo*: Analizará imágenes obtenidas por medio de equipamiento especial como microscopios electrónicos, ópticos, satélites, etc. o a simple vista, si la dimensión real del objeto fotografiado es menor o igual que 1 mm.
- *Vislumbrando el entorno visual y natural*: Analizará imágenes obtenidas con medios tradicionales como cámaras fotográficas que reflejen fenómenos o actividades científico técnicas por simple observación y cuando la dimensión real del objeto fotografiado sea mayor que 1 mm.

2. Se entregará Primero, Segundo y Tercer Premios y todas las Menciones que el jurado considere en cada categoría. Pueden quedar puestos vacíos.

3. Los autores principales de las imágenes deben tener residencia permanente en Cuba y pertenecer o estar vinculados a algún centro o actividad laboral nacional.

4. La fecha tope para la entrega de las imágenes y sus complementos será el 30 de octubre de 2015.

5. Cada concursante podrá enviar hasta tres imágenes por categoría que pueden ser identificadas con un título artístico. En todos los casos deben estar complementadas por una descripción científica corta que contenga la técnica utilizada con no más de 1 000 caracteres junto a las imágenes originales en formato que no exceda los 3 Mb.

6. Las imágenes deben ser archivos tipo JPEG y pueden ser obtenidas por cualquier técnica, ser el resultado de modelación o simulación o ser obtenidas por la combinación de varias imágenes en una sola. Como el Concurso se enfoca en la parte artística los elementos claves a considerar serán estéticos más que científicos, aunque siempre deben tener un vínculo con la ciencia y la tecnología.

7. Las imágenes y sus complementos pueden entregarse directamente en la dirección de la Facultad de Física de la Universidad de la Habana a la Licenciada Mercedes Coderch, o enviarse por correo electrónico a cienciarte@imre.oc.uh.cu indicando en el Asunto del mensaje "apellido1-apellido2" (los dos apellidos con un guión intermedio sin espacios).

En este último caso el tamaño total del mensaje debe ser menor que 3 Mb. Los autores deben identificar la autoría de su trabajo con sus datos de localización

que incluyen nombre completo, dirección del centro de trabajo o personal, correo electrónico y teléfonos. De ser seleccionada la imagen como finalista se solicitará a los autores entregar la imagen definitiva con resolución mínima de 300 dpi.

8. El Comité Organizador del Concurso designará, para cada categoría, un jurado de 3 especialistas que no posean imágenes concursando. Las decisiones son inapelables.

9. El Comité Organizador se compromete a gestionar la divulgación de las imágenes premiadas en los medios nacionales de difusión masiva. Las imágenes premiadas integrarán la Galería de FotoArte Científico que aparecerá en la Web del Concurso.

Premios (en cada categoría):

- Primer Premio: 1000 CUP y Diploma de Reconocimiento
- Segundo Premio: 500 CUP y Diploma de Reconocimiento
- Tercer Premio: 300 CUP y Diploma de Reconocimiento
- Menciones: Diplomas de Reconocimiento

Los premios se entregarán en el acto de celebración por día de la Física en Cuba en enero de 2016.

Dr. Augusto A. Iribarren Alfonso

Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE)

Zapata s/n casi esq. G, Vedado, Plaza

La Habana 10400

Tel.: (537) 878-8957/59, ext. 221

E-mail: cienciarte@imre.oc.uh.cu

Web: www.imre.oc.uh.cu



(Foto: Cortesía de A. Iribarren)

CARTA AL EDITOR: ACERCA DEL MENSAJE DE LA PRESIDENTA DE LA SOCIEDAD CUBANA DE FÍSICA, PUBLICADO EN LA REVISTA CUBANA DE FÍSICA 31, 59 (2014)

LETTER TO THE EDITOR: ON THE MESSAGE OF THE PRESIDENT OF THE SOCIEDAD CUBANA DE FÍSICA PUBLISHED IN THE REVISTA CUBANA DE FÍSICA 31, 59 (2014)

DIEGO DE JESÚS ALAMINO ORTEGA

La recién electa Presidenta de la SCF acostumbrada como está a recibir felicitaciones y reconocimientos, por su brillante carrera científica y por sus dotes directivas, no le extrañará que al iniciar estas palabras lo primero que haga sea felicitarla; realmente lo hago con sinceridad y con la confianza de que la SCF está en “buenas manos”, para sostener con firmeza los derroteros de la física en Cuba y lograr, con la delicadeza femenina, darle un empujoncito más.

Es loable que en su primer mensaje la Presidenta de la SCF manifieste con diaphanidad su preocupación por la situación de la enseñanza de la física en Cuba, cuando expresa: *En las escuelas hay dificultades que van desde la falta de materiales, hasta el espacio físico y la ausencia de laboratorios [...] existe un problema de capacitación. Es obvia la falta de dominio y actualización de los maestros.*

Realmente, los físicos, tachados sistemáticamente de inconformes, no hemos encontrado muchos oídos receptivos ante reiteradas inconformidades, planteadas en cada uno de los Congresos de la SCF, las cuales se evidencian según la titular de la SCF en: *Los problemas de formación básica que arrastran los jóvenes [...] al ingresar en carreras en las que reciben asignaturas de Matemática, Física y Química dentro del currículo base, obtienen por lo general malos resultados en las evaluaciones, lo que resulta en altos índices de arrastre y repitencia.* Traduciéndose en la falta de la necesaria eficiencia de las universidades, fundamentalmente en carreras que tienen que ver con las ciencias y las tecnologías. No es secreto la carencia de docentes de física, ni los altibajos que ha tenido la formación de profesores de física, transitando por variantes que en determinados momentos han hecho desaparecer esta titularidad.

La física, por su base experimental requiere del equipamiento de laboratorio; en un pasado no tan lejano lo hubo en las escuelas y por la falta de conservación, control, mantenimiento y la desidia, amén de la obsolescencia, perdimos el equipamiento. Ahora el país nuevamente ha realizado un esfuerzo y está dotando paulatinamente a escuelas de Secundaria Básica y Preuniversitario de un módulo de laboratorio, que puede responder a las necesidades de la enseñanza de la física en esos niveles. La problemática actual se da en que no existen los locales apropiados para tener en las escuelas un laboratorio de Física,

para que todos los estudiantes puedan en ellos desarrollar sus clases de la asignatura, presenciando las muy necesarias demostraciones experimentales.

Otro orden de cosas es la preparación de docentes y técnicos para el uso y conservación del instrumental, en esto la SCF a lo largo de todo el país puede bien cooperar, activando a sus miembros en este propósito, al igual que para lograr la superación y actualización de los profesores, siempre que se proporcionen los espacios para tales fines. Quien estas líneas suscribe ha tenido la oportunidad de entrenar técnicos de laboratorio, así como profesores de Secundaria Básica y Preuniversitario, para operar el equipamiento y ofrecerle superación postgraduada, en el reducido tiempo que los docentes pueden disponer, apremiados por las complejas exigencias laborales que enfrentan, para cumplir con las requeridas horas clase que deben impartir, aparejadas a la falta de compensación social y salarial. Estas condiciones laborales pueden ser la causa de la solución pragmática a la que apelan los docentes, que consiste en cumplir el programa de estudio como “tradicionalmente” lo han hecho, tratando de que los estudiantes puedan responder lo que “tradicionalmente” se le pregunta en los exámenes y obtener los resultados que se le han programado. O sea, la enseñanza de la física, exceptuando raros casos, se hace de un modo pragmático, funcional, descontextualizado, sin tener en cuenta que desde la física también hay que contribuir a la formación del ciudadano con conciencia crítica y reflexiva que requiere el cambio de época. Un ejemplo de este modo de actuar se obtuvo mediante un ejercicio que se realizó con un grupo de 21 estudiantes de onceno grado. Se les solucionó en la pizarra a los estudiantes un problema de dinámica de la traslación, que habían examinado con resultados satisfactorios unos meses antes en décimo grado y se les solicitó que en la solución identificaran dónde se aplicaba cada una de las leyes de Newton. Solo 4 estudiantes asociaron la tercera ley con el paso correcto y 8 en el caso de la segunda ley, las demás respuestas fueron erráticas, hubo quiénes colocaron la segunda ley en todos o la mayoría de los pasos del problema, al igual que la tercera, y muchos asocian la operatoria matemática a las leyes de Newton. La reacción de los estudiantes antes de comenzar este ejercicio consistió en expresar que si se le hubiera puesto el problema para solucionarlo lo hubieran hecho. Este es un botón de muestra de la forma mecánica, funcional y algorítmica en

que se produce el proceso de enseñanza aprendizaje de la física¹.

Uno de los temas que introduce en su Mensaje la presidenta de la SCF y que como expresa está *íntimamente relacionado con el anterior es la necesidad de fomentar una cultura científica en nuestra sociedad*. Para esto propone la Presidenta realizar una campaña de divulgación científica, para lo cual convoca a la SCF. Pero si desde el aula, no se potencia la cultura científica, entonces seguirán egresando de los cursos de física, individuos con ideas distorsionadas acerca de conceptos fundamentales de la física como pasa con la maltratada energía. Ellos serán caldo de cultivo para ideas pseudocientíficas, como las de la astrología, la piramidología, la ufología y otras que se cubren con el manto del sufijo

-logía y hasta se verán inclinados a aceptar el oscurantismo y la irracionalidad². Si desde el aula no se hace evidente la evolución de la física y la labor de los físicos, tanto en su actividad científica como en su actividad social, la ciencia no será considerada como un factor del desarrollo social y los científicos continuarán siendo considerados como entes enajenados de la sociedad³.

Coincido en que la SCF puede hacer mucho para paliar estos males que nos afectan, y que necesariamente con el apoyo y en conjunción con otros actores de la sociedad, contribuir, como expresa la Presidenta, a que *la ciencia forme parte de la cultura del país*, para lo cual es menester desterrar el criterio reduccionista de que cultura significa únicamente la actividad artística y literaria.

¹ Alamino, D. de J. y Aguilar, Y. La integración de la Historia y la Filosofía de la ciencia a la enseñanza de la ciencia en la escuela, con énfasis en la Física, CD X Taller Internacional "La Enseñanza de la Física y la Química" ENFIQUI 2014, ISBN 978-959-18-0991-9

² Alamino, D. de J. Más que ciencia ¡cultura científica en la escuela! CD X Taller Internacional "La Enseñanza de la Física y la Química" X Taller Internacional "La Enseñanza de la Física y la Química" ENFIQUI 2014, ISBN 978-959-18-0991-9

³ Alamino, D de J. y Aguilar, Y. La historia de la Física y la didáctica, conjunción imprescindible para mejor enseñar física. Experiencias en la escuela; CD VIII Congreso Internacional Didácticas de las Ciencias, ISBN 978-959-18-0973-5.

