

FÍSICA

REVISTA CUBANA DE FÍSICA

FÍSICA

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

VOL.33 No.2
DICIEMBRE, 2016

9 AÑOS, 306 DÍAS Y 23 HORAS DESPUÉS



Portada: Ha habido que esperar casi un decenio, tras el comienzo de la reparación del edificio de Física de la Universidad de La Habana, para que los estudiantes volvieran a recibir clases en las legendarias aulas del cuarto piso (foto: Arbelio Pentón)

EDITOR

E. ALTSHULER

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

EDICIÓN ELECTRÓNICA

J. J. GONZÁLEZ, C. GANDARILLA, E. MARTÍNEZ

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

O. ALMORA

INAM, Universitat Jaume I, España
almora@uji.es

D. MIRAVET

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

EDITORES ASOCIADOS

A. J. BATISTA-LEYVA, O. DÍAZ-RIZO

INTEC, La Habana
abatista@intec.cu, odrizo@intec.cu

W. BIETENHOLZ

UNAM, México
wolbi@nucleares.unam.mx

G. DELGADO-BARRIO

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

V. FAJER-ÁVILA

CEADEN, La Habana
vfajer@ceaden.cu

J. O. FOSSUM

NTNU, Noruega
Jon.fossum@ntnu.no

J. -P. GALAUP

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

J. LLOVERA

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

O. de MELO, R. MULET

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

P. MUNÉ

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

T. PÖSCHEL

University Erlangen-Nuremberg
thorsten.poeschel@fau.de

T. SHINBROT

Rutgers University
shinbrot@soemail.rutgers.edu

C. A. ZEN-VASCONCELOS

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

COORDENADAS

- 75 **9 AÑOS, 306 DÍAS Y 23 HORAS...**
[9 YEARS, 306 DAYS AND 23 HOURS...]
A. Pentón

ARTÍCULOS ORIGINALES

- 77 **EL UMBRAL DE INESTABILIDAD ANIÓNICA EN ÁTOMOS**
[THE ANIONIC INSTABILITY THRESHOLD IN ATOMS]
D. A. León-Valido, A. González, G. Gil-Carrillo
- 83 **DOPPLER ULTRASONIC SYSTEM FOR FLOW MEASUREMENT IN PATIENTS WITH DIABETIC FOOT USING RECONFIGURABLE LOGIC AND WISHBONE ARCHITECTURE**
[SISTEMA ULTRASONICO DOPPLER PARA LA MEDICIÓN DE FLUJO EN PACIENTES CON PIE DIABÉTICO MEDIANTE EL EMPLEO DE LÓGICA RECONFIGURABLE Y ARQUITECTURA WISHBONE]
E. Carrillo, A. Jiménez, E. Moreno, L. Leija, A. Vera, A. Ramos
- 89 **ON THE ONSET OF INSTABILITY OF A VISCOELASTIC FLUID SATURATING A POROUS MEDIUM IN ELECTROHYDRODYNAMICS**
[SOBRE LA APARICIÓN DE INESTABILIDAD PARA UN FLUIDO VISCOELÁSTICO QUE SATURA UN MEDIO POROSO EN LA ELECTROHIDRODINÁMICA]
G. C. Rana, R. Chand, V. Sharma
- 95 **INTRUDER PENETRATION IN GRANULAR MATTER STUDIED BY LOCK-IN ACCELEROMETRY**
[PENETRACIÓN DE INSTRUSOS EN UN MEDIO GRANULAR ESTUDIADA MEDIANTE ACELEROMETRÍA LOCK-IN]
L. Alonso-Llanes, G. Sánchez-Colina, E. Martínez, A.J. Batista-Leyva, R. Toussaint, E. Altschuler
- 98 **LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER EN EL CONTEXTO DE LA MECÁNICA DE FLUIDOS**
[SCHRÖDINGER'S EQUATION IN THE CONTEXT OF FLUID MECHANICS]
D. Cabrera, P. Fernández de Córdoba, J. M. Isidro, J. M. Valdés Placeres, J. Vázquez-Molina
- 102 **ESTUDIO DE LA REACCIÓN $\text{Si}^{(3P)} + \text{OH}(X^2\Pi) \rightarrow \text{SiO}(X^1\Sigma^+) + \text{H}(^2S)$ MEDIANTE EL MÉTODO DEL POTENCIAL PROMEDIO DEL ESPACIO DE FASE (MPPST)**
[MEAN POTENTIAL SPACE THEORY STUDY OF THE $\text{Si}^{(3P)} + \text{OH}(X^2\Pi) \rightarrow \text{SiO}(X^1\Sigma^+) + \text{H}(^2S)$ REACTION]
R. Panadés-Barrueta, A. Rivero-Santamaría, J. Rubayo-Soneira, M. Monnerville, P. Larregaray, F. Dayou
- 118 **A SIMPLE SETUP TO OBTAIN FERROELECTRIC THIN FILMS BY DIP-COATING**
[UN SENCILLO SISTEMA EXPERIMENTAL PARA OBTENER CAPAS DELGADAS POR EL MÉTODO DE INMERSIÓN]
C. E. Moreno-Crespo, A. Peláiz-Barranco, A. Santana-Gil, Y. Méndez-González, J. D. S. Guerra, Y. González-Abreu, P. Saint-Grégoire, O. García-Zaldívar, F. Calderón-Piñar
- 122 **LIGHT TRANSPORT IN BIOLOGICAL TISSUES USING GPU**
[TRANSPORTE DE LUZ EN TEJIDOS BIOLÓGICOS UTILIZANDO PROCESADORES GRÁFICOS]
N. López-Marín, F. Corrales-Machín, E. Castro-Alvarez, R. Rodríguez-Fernández
- 127 **"FLUX-FLOW" DE VÓRTICES DE ABRIKOSOV-JOSEPHSON EN CERÁMICAS SUPERCONDUCTORAS DE Bi-2223**
[FLUX-FLOW OF ABRIKOSOV-JOSEPHSON VORTICES IN Bi-2223 SUPERCONDUCTING CERAMICS]
J.R. Fernández-Gamboa, A. Cruz-García, P. Muné, E. Altschuler, O. Vázquez-Robaina, R. F. Jardim
- 134 **COMUNICACIONES ORIGINALES**
PRELIMINARY CUANTIFICATION OF FREELY EXPLORING ATTA INSULARIS
[CUANTIFICACIÓN EXPERIMENTAL DE LA EXPLORACIÓN LIBRE EN ATTA INSULARIS]
A. Reyes, G. Rodríguez, E. Altschuler

- 137 **CAMBIOS INFORMACIONALES EN BIOMOLÉCULAS CAUSADOS POR RADIACIONES IONIZANTES: LO QUE PUEDE DECIR LA ENTROPÍA DE TSALLIS**
[INFORMATIONAL CHANGES IN BIOMOLECULES CAUSED BY IONIZING RADIATIONS: WHAT TSALLIS ENTROPY CAN SAY]
L. Rodríguez, R. Cárdenas, L. González, O. Rodríguez

ARTÍCULOS DE REVISIÓN

- 139 **EFFECTOS FÍSICOS INDUCIDOS EN CULTIVOS *IN VITRO* EXPUESTOS A CAMPOS ACÚSTICOS**
[INDUCED PHYSICAL EFFECTS ON AN *IN VITRO* CELL CULTURE EXPOSED TO ACOUSTIC FIELDS]
A. Vargas, I. C. Navarrete, I. González, M. Camacho

PARA FÍSICOS Y NO FÍSICOS

- 150 **PREMIO NOBEL DE FÍSICA DE 2016: EFECTO HALL CUÁNTICO Y AISLANTES TOPOLÓGICOS**
[THE 2016 NOBEL PRICE IN PHYSICS: QUANTUM HALL EFFECT AND TOPOLOGICAL INSULATORS]
O. de Melo

- 156 **BEREZINSKII-KOSTERLITZ-THOULESS TRANSITION AND THE HALDANE CONJECTURE: HIGHLIGHTS OF THE PHYSICS NOBEL PRIZE 2016**
[LA TRANSICIÓN BEREZINSKII-KOSTERLITZ-THOULESS Y LA CONJETURA DE HALDANE: HECHOS DESTACADOS DEL PREMIO NOBEL DE FÍSICA 2016]
W. Bietenholz, U. Gerber

MOMENTOS DE LA FÍSICA EN CUBA

- 169 **FORMACIÓN DOCTORAL FRANCIA-CUBA EN FÍSICA-QUÍMICA MOLECULAR: 10 AÑOS DE UNA EXPERIENCIA EXITOSA**
[FRANCE-CUBA DOCTORAL FORMATION IN MOLECULAR PHYSICS-CHEMISTRY: 10 YEARS OF A SUCCESSFUL EXPERIENCE]
M. L. González-Martínez, P. Larrégaray, J. Rubayo-Soneira, J.-C. Rayez

- 174 **NUESTRA FÍSICA EN NOTICIAS**

9 AÑOS, 306 DÍAS Y 23 HORAS...

9 YEARS, 306 DAYS AND 23 HOURS...

A. PENTÓN

Decano de la Facultad de Física

...debieron pasar para regresar a nuestro edificio de la facultad de Física de la Universidad de La Habana, que debimos abandonar en el año 2006 para que comenzara su reparación. Ese tiempo puede medirse también en cinco graduaciones que nunca conocieron el edificio de su facultad, en cuatro profesores que no les alcanzó la vida para regresar al recinto donde entregaron sus mejores años; en pérdidas de recursos humanos y materiales. Quizás pudiéramos intentar medirlo en términos de la grandeza del espíritu de los que, a pesar de todo, decidieron echar rodilla en tierra y mantener viva la Física fuera de su casa, para casi después de un decenio, apenas comenzar el regreso a la "tierra prometida". Pero este último criterio resulta intangible.

El edificio de Física no solo representa un lugar donde se forman recursos humanos de excelencia, o donde se contribuye cada día al patrimonio del conocimiento científico del país. El edificio, sede inicial de la Escuela de Ingenieros y Arquitectos de la Universidad de La Habana, es parte del patrimonio de nuestra casi tricentenaria casa de altos estudios en muchos aspectos. Baste decir que fue trinchera de las luchas de nuestro estudiantado contra la tiranía de Batista, liderados por José Antonio Echevarría, que hacia fines de la década de 1950 estudiaba Arquitectura en nuestro edificio. Sobran, en una palabra, razones para "mantenerlo vivo".

Durante cerca de un decenio, profesores y estudiantes de Física hemos mantenido la docencia y la investigación esparcidos por toda la colina universitaria y sus alrededores, muchas veces trabajando en condiciones extremas. Sin embargo, cuando el 8 de septiembre de 2016 se "re-inauguraron" las aulas del cuarto piso del edificio de Física, no llegamos con las manos vacías. Hoy tenemos una carrera de excelencia y programas de maestría y doctorado de igual categoría, según las comisiones nacionales correspondientes. Hoy exhibimos la razón artículo científico / profesor más alta del país, y un número importante de reconocimientos nacionales e internacionales a nuestra actividad científica. Tenemos, además, los que creemos son los mejores estudiantes de la universidad. Hemos mantenido, a pesar de la diáspora, un sentido de equipo del que estamos orgullosos.

A lo largo de estos años hemos sido, ciertamente, ejemplo de cosas positivas. Pero de algún modo también hemos servido para ejemplificar muchas cosas negativas. Y es que nos tocó ilustrar lo que el país no se puede permitir: no podemos aceptar que la sociedad a la que aspiramos se construya sobre la base de la ineficiencia, la irresponsabilidad y la chapucería.

Y de eso, lamentablemente, ha habido mucho en la obra reconstructiva de la Facultad de Física.



Figura 1. *Signos de la desidia*: Arriba, ventana de una de las aulas del edificio de Física, que ha perdido ya gran parte de las tablillas por haber usado una madera "verde". Abajo: techo de otra de las aulas, poco después de haber sido entregada oficialmente.

Más allá de los defectos en el proceso de reconstrucción —que van desde columnas inclinadas hasta techos que siguen cayéndose a pedazos— nuestro claustro y nuestro alumnado

posee el rigor y los deseos para que la Facultad de Física sea capaz de emular a sus homólogas del mundo. Pero para ello es menester, ante todo, cuidar lo que tenemos, y en la medida de lo posible, devolverle el lustre de otras épocas. Esa tiene que ser nuestra filosofía a partir de ahora.

En el día de hoy nos encontramos enfrascados en la ocupación del tercer piso –el “cuartel general” de nuestros profesores y trabajadores administrativos. Sin embargo,

cuando termino de escribir esta reseña han pasado 10 años, 70 días y 14 horas desde que entregamos el edificio allá por el año 2016, y esperamos aún la entrega de los primeros dos pisos del edificio, donde se albergarán los laboratorios docentes y las áreas de investigación. ¿Cuántos años, días y horas más deberá marcar el cronómetro de la Física en Cuba para ver terminada una obra que debió haber finalizado en menos de un quinquenio?

EL UMBRAL DE INESTABILIDAD ANIÓNICA EN ÁTOMOS

THE ANIONIC INSTABILITY THRESHOLD IN ATOMS

DARIO A. LEÓN VALIDO^a, GABRIEL GIL^b Y AUGUSTO GONZÁLEZ^{b†}

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

b) Instituto de Cibernética, Matemática y Física, Ciudad de La Habana; agonzale@icimaf.cu[†]

† autor para la correspondencia

Recibido 16/9/2014; Aceptado 8/1/2016

En este trabajo se estima el umbral de carga nuclear, Z_c , por debajo del cual el átomo se vuelve inestable. Para ello se utiliza un procedimiento de interpolación, desarrollado por Kais y colaboradores, basado en una ecuación de Schrödinger efectiva para el electrón más externo. Los resultados son comparados con valores obtenidos de un modelo nuestro de fuerzas de radio nulo, que tiene como parámetros de entrada los datos experimentales del radio covalente y la electroafinidad.

In this work is estimated the nuclear charge threshold, Z_c , at which an atom turns unstable. In order to achieve it, an interpolation procedure based on an effective Schrödinger equation for the most external electrons is used. The results are compared with our own force model for null radius, where the input parameters are the experimental values for the covalent radius and electroaffinity.

PACS: Atomic ions 32.30.-r; anionic instability threshold 32.10.Hq; binding energy 31.15.-p

I. INTRODUCCIÓN

La carga eléctrica de los electrones y protones está cuantizada. Como consecuencia, la carga nuclear, Z , sólo puede tomar valores enteros. Sin embargo, en ocasiones, imaginar Z como un parámetro libre puede conducirnos a una dinámica simplificada a partir de la cual podemos aprender acerca de la física de los átomos reales. Por ejemplo, en el marco de la Mecánica Cuántica no relativista podemos tomar el límite de Z grandes, en el cual los electrones se mueven aproximadamente libres en el campo nuclear y la repulsión de Coulomb mutua puede tomarse en cuenta por teoría de perturbaciones. Por otra parte, si consideramos el límite opuesto y comenzamos a disminuir la carga, rápidamente encaramos un umbral de inestabilidad, $Z = Z_c$, por debajo del cual el átomo se ioniza espontáneamente, emitiendo un electrón. Se ha probado que la carga nuclear crítica está muy cerca de la carga nuclear del anión simplemente cargado [1], $Z_c \lesssim N - 1$, donde N es el número de electrones. En efecto, no se han encontrado aniones doblemente cargados estables en experimentos ni en cálculos teóricos [2].

La búsqueda de estos aniones ha estimulado el cálculo de Z_c , entendido como un parámetro real (no entero). Existen cálculos de primeros principios para átomos pequeños ($N \leq 18$) [3]. La extensión a átomos más grandes hace uso de una ecuación de Schrödinger efectiva para el electrón más externo, diseñada para ajustar el potencial de ionización del átomo neutro ($Z = N$) y la electroafinidad del anión ($Z = N - 1$) [1]. Notar que tanto el potencial de ionización como la electroafinidad son magnitudes que caracterizan al átomo multielectrónico. La ecuación de Schrödinger efectiva para el último electrón hay que entenderla más como un procedimiento de extrapolación para hallar Z_c que como una descripción exacta del último orbital ocupado.

En el presente trabajo comprobamos y completamos los cálculos reportados en la Ref. [1] y los comparamos con resultados provenientes de un modelo nuestro [4], basado en la teoría de fuerzas de radio nulo [5], para calcular la pendiente de la curva de energía de enlace del último electrón en $Z = N - 1$. Este modelo usa el radio covalente y la electroafinidad del átomo neutro con $N - 1$ electrones [6] como parámetros de entrada. Reportamos Z_c para todos los elementos de la tabla periódica que tienen un anión estable.

Además, con el objetivo de comprobar la validez del modelo de fuerzas de radio nulo, estimamos el potencial de ionización de átomos neutros y lo comparamos con datos experimentales [7].

II. VALORES DE Z_c A PARTIR DEL PROCEDIMIENTO DE INTERPOLACIÓN DE KAIS

Sergeev y Kais [1] usaron el siguiente Hamiltoniano:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{Z}{r} + \frac{N-1}{r} (1 - e^{-\delta r}), \quad (1)$$

para describir de manera efectiva al electrón más externo en un átomo multielectrónico. El potencial que ellos emplearon es el llamado potencial de Hellman (Coulomb + Yukawa), que reproduce correctamente los dos límites de corto y largo alcance. Para $r \rightarrow \infty$, el electrón se mueve en el campo coulombiano de un núcleo efectivo (el núcleo atómico rodeado por electrones internos) con carga efectiva $Z_{ef} = Z - N + 1$. Por otra parte, para $r \rightarrow 0$, el electrón interactúa con el campo nuclear atractivo $V(r) = -Z/r$.

Reescalando las coordenadas electrónicas $r \rightarrow r/Z$, obtenemos un nuevo Hamiltoniano:

$$\hat{h} = \frac{\hat{H}}{Z^2} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{1}{r} + \frac{g}{r} (1 - e^{-\delta r}), \quad (2)$$

donde $g = (N - 1)/Z$ y $\delta \rightarrow \delta Z$. La ecuación de Schrödinger para el electrón que ocupa la órbita más externa, $\chi(r)$, puede ser escrita como $H|\chi\rangle = E_b|\chi\rangle$, donde E_b es la energía del electrón en el estado $|\chi\rangle$. El reescalamiento transforma la última ecuación en $h|\chi\rangle = \epsilon_b|\chi\rangle$, donde $\epsilon_b = E_b/Z^2$. El problema característico puede expresarse en forma matricial usando una base de funciones y la matriz puede ser diagonalizada mediante el álgebra numérica tradicional.

Así, definimos los elementos de matriz:

$$h_{\alpha\beta} = \langle \phi_\alpha | \hat{h} | \phi_\beta \rangle = \int_0^\infty \phi_\alpha(r) \hat{h} \phi_\beta(r) r^2 dr, \quad (3)$$

y la matriz de solapamiento:

$$S_{\alpha\beta} = \langle \phi_\alpha | \phi_\beta \rangle = \int_0^\infty \phi_\alpha(r) \phi_\beta(r) r^2 dr. \quad (4)$$

En general, la base de funciones no tiene que ser ortonormal, lo que conduce a un problema generalizado de autovalores y autovectores:

$$\sum_\beta h_{\alpha\beta} C_\beta = \epsilon \sum_\beta S_{\alpha\beta} C_\beta, \quad (5)$$

donde los coeficientes $\{C_\alpha\}$ se definen por:

$$|\chi\rangle = \sum_\alpha C_\alpha |\phi_\alpha\rangle. \quad (6)$$

Las funciones base deben satisfacer:

$$\phi_\alpha(r)|_{r=0} = 0, \quad (7)$$

y deben ser cuadrado integrable. Resulta conveniente escogerlas en la forma:

$$\phi_\alpha(r) = N_\alpha r^{l+1} e^{-\alpha r}, \quad (8)$$

donde:

$$N_\alpha = \frac{(2\alpha)^{l+3/2}}{\sqrt{(2l+2)!}}. \quad (9)$$

En nuestros cálculos tomamos α en la secuencia $5/i$, $i = 1, \dots, D$, y variamos D entre 300 y 800 en dependencia de la rapidez de convergencia de cada autovalor.

El hamiltoniano \hat{h} tiene autovalores cercanos a cero y autofunciones con varios nodos, lo cual conduce a inestabilidades numéricas a la hora de representarlo como una matriz y diagonalizarlo. Para resolverlas utilizaremos un algoritmo muy efectivo, aunque poco conocido [8]:

1. Se generan aleatoriamente $d \ll D$ vectores \vec{x}_I .
2. Se crea un nuevo conjunto de vectores mediante la operación $\vec{y}_I = h\vec{x}_I$.

3. Se obtiene una base ortonormal $\{\vec{z}_I\}$, aplicando el método de Gram-Schmidt a los vectores $\{\vec{y}_I\}$.
4. Se representan h y S en la base $\{\vec{z}_I\}$, $I = 1, \dots, d$.
5. Se soluciona el problema generalizado de autovalores dado por la Ec. (5).

El nuevo problema está libre de falsos autovalores. La razón de semejante comportamiento viene dada por la uniformidad de la distribución de vectores aleatorios en un dominio. El kernel de la aplicación lineal es dimensionalmente menor que el espacio original, por tanto, la probabilidad de que algún vector \vec{y}_I pertenezca al kernel es muy pequeña.

En la práctica tomamos la cantidad de vectores d entre 20 y 50.

Procediendo de esa manera, hallamos los autovalores de h con mucha más exactitud que en la Ref. [1]. Además, consideramos átomos no estudiados en ese trabajo.

Como se mencionó anteriormente, los autovalores de \hat{H} determinan la energía del electrón más externo. Cuando $Z = N$ (átomo neutro), esa energía es igual a *menos* el potencial de ionización del átomo, $E_b = -I_p$. Entonces, en $Z = N$, ajustamos el parámetro δ a un valor δ_0 que garantice que $E_b = -I_p$. De la misma manera, cuando $Z = N - 1$ (el anión), E_b debe ser igual a la electroafinidad del átomo con $N - 1$ electrones, $E_b = -E_a$ y debemos encontrar el parámetro δ_1 para el cual se cumpla esa igualdad.

Para determinar Z_c , definida como la Z para la cual $E_b = 0$, usaremos una extrapolación para δ como función de Z . Seguimos la misma receta dada por Kais en la Ref. [1], que consiste en postular δ como una función lineal de la variable $\gamma = (N - 1)/Z$:

$$\delta(Z) = \delta_1 + N(\gamma - 1)(\delta_1 - \delta_0). \quad (10)$$

III. VALORES DE Z_c A PARTIR DEL MODELO DE FUERZAS DE RADIO NULO

En nuestro modelo de fuerzas de radio nulo [4], partimos de una expresión muy similar a la Ec. (2):

$$\left\{ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \Theta(r - R) \frac{\alpha}{r} + \frac{l(l+1)}{2r^2} \right\} \chi(r) = E_b \chi(r), \quad (11)$$

donde $V(r)$ da cuenta de la interacción de corto alcance de los electrones con el núcleo efectivo. Su radio efectivo, R , debe ser similar al del átomo de $N - 1$ electrones. La interacción coulombiana de largo alcance actúa solamente para $r > R$, Θ es la función paso unitario, y exhibe una carga efectiva $-\alpha = Z - (N - 1)$. l es el momento angular del orbital externo. Nótese que $\alpha = -1$ corresponde al átomo neutro ($Z = N$), mientras el anión ($Z = N - 1$) está asociado al valor $\alpha = 0$.

En términos rigurosos, es conocido [9] que, bajo la suposición $N - 2 < Z_c < N - 1$, la dependencia de E_b con Z es lineal cerca de Z_c . La afirmación anterior es consecuencia del hecho de que $\phi_e(r)$ permanece normalizado en el umbral ($\chi(r) \sim \exp -2\sqrt{\alpha_c}r$). La pendiente de la curva en Z_c puede ser calculada con ayuda del teorema de Feynman-Hellman

como $-\langle\phi_e|\Theta(r-R)1/r|\phi_e\rangle/\langle\phi_e|\phi_e\rangle$. El caso $Z_c = N - 1$, o sea $E_a(N - 1) = 0$, es especial y requiere un tratamiento diferente.

Podemos calcular la pendiente de la curva no en Z_c , sino cuando $\alpha = 0$ y el núcleo es estrictamente neutral. En ese caso $V(r)$ soporta un estado ligado en $-E_a$ y $\chi(r)$ para largas distancias se comporta como:

$$\chi(r) \sim \exp(-\kappa r), \quad (12)$$

donde $\kappa = \sqrt{2E_a}$. El término dependiente de l en la Ec. (12) produce correcciones que decaen aún más rápido con r .

Usamos la Ec. (12) para calcular la pendiente. Esto corresponde a un modelo de teoría de fuerzas de radio nulo que, en principio, debe ser válida cuando el radio efectivo de $\chi(r)$, $1/\sqrt{2E_a}$, sea mayor que R . Los detalles de la función de onda para $r < R$ no son importantes. Para la pendiente obtenemos:

$$s = \left. \frac{dE_b}{dZ} \right|_{Z=N-1} = -\frac{\int_R^\infty dre^{-2\kappa r}/r}{\int_R^\infty dre^{-2\kappa r}}. \quad (13)$$

Hacemos uso de la dependencia aproximadamente lineal de E_b con Z en la vecindad del anión ($Z \approx N - 1$) para estimar Z_c . En $Z = N - 1$, la energía es $E_b = -E_a$, mientras la pendiente está dada por la Ec. (13), entonces:

$$E_b \approx -E_a - s(N - Z - 1). \quad (14)$$

La carga nuclear crítica, Z_c , es la carga para la cual $E_b = 0$. Si escribimos $Z_c = N - 1 - g_c$, entonces para g_c obtenemos:

$$g_c \approx -\frac{E_a}{s}. \quad (15)$$

A continuación, se compara la estimación dada por la Ec. (15) con los números provenientes de la interpolación de Kais. Los resultados se muestran en la Tabla 1 y gráficamente en la Fig. 1. Puede observarse que la concordancia es buena a pesar de la simplicidad de la Ec. (15).

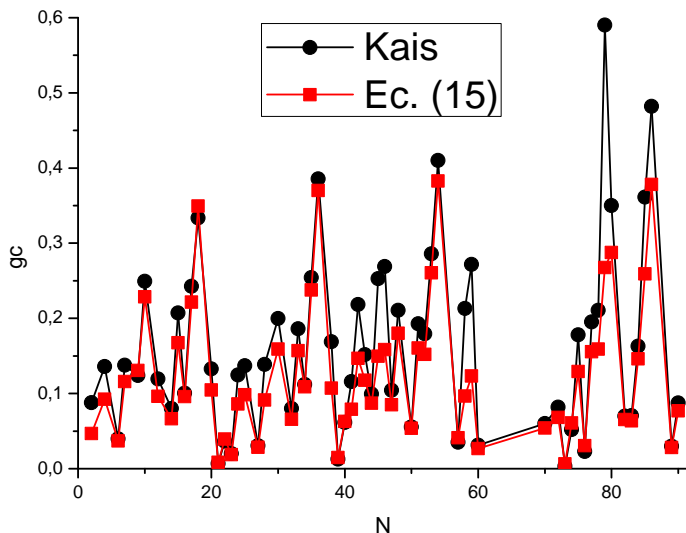


Figura 1. Valores de g_c calculados de acuerdo con el esquema de Kais y según el modelo de fuerzas de radio nulo, Ec. (15).

IV. DISCUSIÓN

Hemos incluido en la Tabla 1 todos los valores calculados así como los datos utilizados para hallarlos. En la práctica nos dimos cuenta de que los autovalores de h eran muy sensibles a los parámetros d y D escogidos para un elemento en particular. Muchos de los valores reportados por Kais difieren de los valores, mucho más precisos, calculados por nosotros. Resaltamos la inestabilidad de los δ_1 de los elementos yterbio, wolframio y plomo.

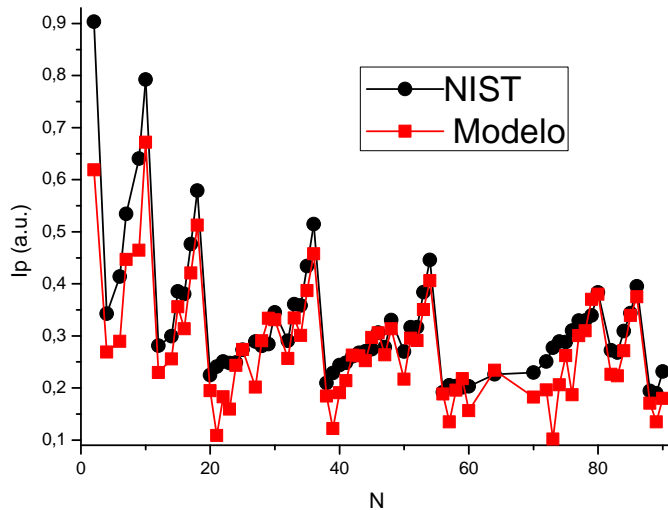


Figura 2. Comparación entre los potenciales reportados por el NIST [7] y las estimaciones a partir del modelo de fuerzas de radio nulo, Ec. (16).

Analizando las desviaciones más notables, podemos notar que en los aniones con $N = 30, 38, 42, 45, 75, 77, 79$ y $80, 85, 86$ las condiciones de validez del modelo de fuerzas de radio nulo no se dan. En efecto, en estos casos $R \lesssim 1/\sqrt{2E_a}$. El caso del oro ($N = 79$) presenta grandes desviaciones de la linealidad en la extrapolación ya que $R > 1/\sqrt{2E_a}$. En otros aniones, como el paladio ($N = 46$), además de cumplirse que $R \lesssim 1/\sqrt{2E_a}$, el orbital más externo es dudoso, obteniéndose convergencia para el orbital 4d y ninguna para el 5s. También ocurre en el praseodimio ($N = 59$), donde hay convergencia para el 4f y no para el 5d, y para el platino ($N = 78$), convergiendo el 5d y no el 6s. Como casos extremos tenemos los elementos cobre, bario, gadeolinio y radio, $N = 29, 56, 64$ y 88 , respectivamente, para los cuales no se encontró ningún intercepto. Esta es una de las deficiencias del algoritmo de Kais y pensamos que está relacionada con la forma en que se escoge la interpolación lineal.

V. POTENTIAL DE IONIZACIÓN A PARTIR DEL MODELO DE FUERZAS DE RADIO NULO

Como una verificación cualitativa de la validez de nuestro modelo, extrapolamos la dependencia lineal dada por Ec. (14) hasta $Z = N$ para estimar el potencial de ionización de átomos neutros y comparamos esos valores con datos experimentales [7]. La hipótesis es que la electroafinidad y el radio covalente del átomo con $N - 1$ electrones determinan el

potencial de ionización del átomo con N electrones mediante de la expresión:

$$I_p = E_a - s. \quad (16)$$

La comparación se encuentra en la Fig. 2. Es evidente que se reproduce la dependencia cualitativa de I_p con N con esta simple expresión, aunque notamos desviaciones.

El hecho de que I_p puede ser reproducido cualitativamente por la dependencia lineal de E_b con Z que viene del umbral de inestabilidad aniónica, puede ser entendido como una indicación de que, al menos considerando esta propiedad, el régimen físico bajo el cual los átomos neutros operan está más cerca del umbral de inestabilidad que del régimen de valores grandes de Z descrito por la teoría de Thomas-Fermi [10–12].

VI. CONCLUSIONES

En el trabajo recalculamos, con mucha mayor exactitud, los valores umbrales de carga nuclear, a partir del procedimiento de Kais, para casi todos los elementos de la tabla periódica. Encontramos buena concordancia con un modelo simple basado en la teoría de fuerzas de radio nulo. Debido a deficiencias inherentes al método de Kais, en algunos casos no existe solución para Z_c . El modelo de fuerzas de radio nulo también nos proporciona estimaciones del potencial de ionización que, aunque no muy precisas, reproducen cualitativamente sus valores.

REFERENCES

- [1] A.V. Sergeev and S. Kais, *Int. J. Quant. Chem.* 75, 533 (1999); S. Kais and P. Serra, *Int. Rev. Phys. Chem.* 19, 97 (2000).
- [2] K.H. Chang, R.D. McKeown, R.G. Milner and J. Labrenz, *Phys. Rev. A* 35 (9), 3949 (1987); A. Dreuw and L.S. Cederbaum, *Chem. Rev.* 102, 181 (2002); Q. Wei, S. Kais and N. Moiseyev, *J. Chem. Phys.* 124, 201108 (2006).
- [3] H. Hogreve, *J. Phys. B* 31, L439 (1998).
- [4] G. Gil and A. González, *Mod. Phys. Lett. B* 27, 1350178 (2013).
- [5] H. A. Bethe, *Phys. Rev.* 76, 38-50 (1949); L.D. Landau and Ya.A. Smorodinsky, *Lectures on Nuclear Theory*, (Plenum Press, New York), 1959.
- [6] Royal Society of Chemistry website <http://www.rsc.org/periodic-table/>. Data References: W.M. Haynes (ed.) *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, CRC Press, Boca Raton, 2011; G.W.C. Kaye and T.H. Laby, *Tables of Physical and Chemical Constants*, Longman, Essex, 1995.
- [7] A. Kramida, Yu. Ralchenko, J. Reader and NIST ASD Team (2012). NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.0), [Online]. Available: <http://physics.nist.gov/asd> [2013, March 4]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.
- [8] N. Halko, P.G. Martinsson and J.A. Tropp (eds.), *Finding structure with randomness: probabilistic algorithms for constructing approximate matrix decompositions*.
- [9] D.K. Gridnev, *J. Math. Phys.* 53, 102108 (2012).
- [10] L.H. Thomas, *Proc. Camb. Phil. Soc.* 23, 542 (1927); E. Fermi, *Rend. Accad. Naz. Lincei* 6, 602 (1927).
- [11] D.A. Kirzhnits, Yu.E. Lozovik and G.V. Shpatakovskaya, *Sov. Phys. Usp.* 18, 649 (1975); E.H. Lieb, *Rev. Mod. Phys.* 53, 603 (1981); L. Spruch, *Rev. Mod. Phys.* 63, 1512 (1991).
- [12] R. Carcasses, A. Gonzalez, *Phys. Rev. A* 80, 024502 (2009).

Tabla 1. Valores de g_c

N	Átomo neutro	nl	$I_p(N)$	$E_a(N-1)$	$R_{cov}(N-1)$	δ_0	δ_1	$g_c(Kais)$	$g_c(Modelo)$
2	He	1s	0.903568	0.027706	0.604712	1.06656	0.880902	0.08761	0.046857
4	Be	2s	0.342602	0.022705	2.45664	0.338749	0.258051	0.13588	0.0921681
6	C	2p	0.413808	0.010276	1.58737	0.255266	0.217481	0.03951	0.0367817
7	N	2p	0.53412	0.046366	1.41729	0.241772	0.212598	0.13761	0.115729
9	F	2p	0.640276	0.053676	1.4173	0.238997	0.214998	0.12388	0.1307
10	Ne	2p	0.792481	0.124985	1.13384	0.231808	0.211304	0.24942	0.228429
12	Mg	3s	0.280993	0.020129	3.02356	0.161571	0.129974	0.11936	0.096117
14	Si	3p	0.299568	0.015901	2.34326	0.128333	0.111452	0.08018	0.0663544
15	P	3p	0.385378	0.051082	2.15429	0.122911	0.109656	0.2073	0.167552
16	S	3p	0.380723	0.027452	2.0598	0.123711	0.111125	0.10052	0.0959167
17	Cl	3p	0.47655	0.076328	1.96532	0.119793	0.10929	0.24248	0.221698
18	Ar	3p	0.579154	0.132775	1.88973	0.116817	0.107827	0.33353	0.349367
20	Ca	4s	0.224654	0.018422	3.77945	0.0896538	0.0747888	0.13283	0.104488
21	Sc	3d	0.24113	0.000902	3.28812	0.0994536	0.091335	0.00661	0.00837266
22	Ti	4p	0.250644	0.006906	3.00467	0.0751813	0.0675302	0.03634	0.0392541
23	V	4s	0.247682	0.002902	2.72121	0.0887703	0.0774278	0.0201	0.0185436
24	Cr	4s	0.248664	0.019287	2.72121	0.0893302	0.075405	0.12476	0.0861601
25	Mn	4s	0.273195	0.024467	2.45664	0.0871282	0.0751374	0.13679	0.0981606
27	Co	4s	0.289008	0.005547	2.34326	0.0866901	0.0771917	0.0304	0.0283189
28	Ni	4s	0.28067	0.02432	2.22988	0.0879597	0.0755517	0.1386	0.0914276
29	Cu	-	0.284091	0.042467	2.21098	-	-	-	0.145687
30	Zn	4s	0.34523	0.045369	2.30547	0.0839355	0.0746769	0.1998	0.158876
32	Ge	4p	0.290298	0.015797	2.32436	0.0744514	0.0675142	0.0801	0.0656484
33	As	4p	0.360702	0.045312	2.26767	0.0727149	0.0669925	0.1859	0.156828
34	Se	4p	0.358393	0.029546	2.26767	0.0728253	0.0673034	0.112	0.108935
35	Br	4p	0.434149	0.07427	2.22988	0.0714816	0.0666582	0.2541	0.237729
36	Kr	4p	0.514475	0.123625	2.21098	0.0703766	0.0661007	0.3855	0.370198
38	Sr	5s	0.20928	0.017851	4.06291	0.0572689	0.0489165	0.1688	0.107195
39	Y	4d	0.22848	0.001763	3.59048	0.0618596	0.0580956	0.0126	0.0146824
40	Zr	5p	0.243789	0.011278	3.32592	0.0489302	0.0449523	0.0615	0.0629191
41	Nb	4d	0.248381	0.01565	3.09915	0.0616025	0.0580299	0.1159	0.0789891
42	Mo	5s	0.260642	0.03366	2.94797	0.0546169	0.048524	0.2183	0.146803
43	Tc	5s	0.267533	0.027479	2.759	0.054444	0.0487636	0.1518	0.117507
44	Ru	5s	0.270491	0.020205	2.60782	0.0544572	0.0490558	0.0995	0.0870286
45	Rh	5s	0.274107	0.038573	2.57003	0.0544381	0.048529	0.2529	0.149434
46	Pd	4d	0.306373	0.041769	2.53223	0.0610524	0.0579478	0.269	0.158348
47	Ag	5s	0.278419	0.020646	2.45664	0.0545197	0.049139	0.1042	0.0850949
48	Cd	5s	0.330514	0.047831	2.57003	0.0528306	0.0484431	0.21075	0.180024
50	Sn	5p	0.269882	0.011021	2.68341	0.0486205	0.0450347	0.0554	0.0535555
51	Sb	5p	0.31635	0.040853	2.64562	0.0479284	0.044718	0.1928	0.160387
52	Te	5p	0.31635	0.038426	2.64562	0.0479494	0.0447569	0.1795	0.152111
53	I	5p	0.384074	0.072433	2.58893	0.0471871	0.0444753	0.2858	0.260385
54	Xe	5p	0.445763	0.112416	2.57003	0.0466429	0.0441987	0.4102	0.38275
56	Ba	-	0.191525	0.017346	3.89284	-	-	-	0.101352
57	La	6p	0.204948	0.005313	4.49755	0.0347671	0.0320993	0.035	0.0410757
58	Ce	5d	0.20354	0.017266	3.66607	0.0422375	0.0399643	0.2131	0.096666
59	Pr	4f	0.201115	0.023887	3.4771	0.0514056	0.0498041	0.2719	0.123088
60	Nd	4f	0.203039	0.004042	3.21253	0.0513798	0.0498267	0.0314	0.0265335
64	Gd	-	0.226001	0.03174	3.4582	-	-	-	0.157018
70	Yb	6s	0.229826	0.009334	3.34482	0.0384963	0.0346345	0.06	0.0539257
72	Hf	5d	0.250817	0.0124902	3.28812	0.0417663	0.0399962	0.0818	0.0680206
73	Ta	5d	0.277442	0.000625	3.09915	0.0416742	0.040023	0.003	0.00618139
74	W	6s	0.288997	0.011829	2.98577	0.0370387	0.0346	0.052	0.0609043
75	Re	5d	0.287874	0.029987	2.83459	0.0416187	0.0399625	0.17802	0.129126
76	Os	5d	0.310099	0.0055106	2.66451	0.0415495	0.0400132	0.0229	0.03039
77	Ir	5d	0.329532	0.04041	2.57003	0.0414911	0.0399456	0.1951	0.155556
78	Pt	5d	0.329227	0.042482	2.49444	0.0414815	0.0399437	0.2106	0.158932
79	Au	5d	0.339029	0.078203	2.45664	0.041449	0.0398813	0.59	0.267651

N	Átomo neutro	nl	$I_p(N)$	$E_a(N - 1)$	$R_{cov}(N - 1)$	δ_0	δ_1	$g_c(Kais)$	$g_c(Modelo)$
80	Hg	6s	0.38357	0.084854	2.45664	0.0358649	0.0337561	0.3499	0.28766
82	Pb	6p	0.272554	0.013855	2.72121	0.0340486	0.0320829	0.07	0.0653151
83	Bi	6p	0.267735	0.013372	2.7401	0.034094	0.0320877	0.0705	0.063708
84	Po	6p	0.309206	0.034619	2.83459	0.0337637	0.0319752	0.163	0.146162
85	At	6p	0.343595	0.069824	2.68341	0.0335399	0.031818	0.36134	0.259107
86	Rn	6p	0.394997	0.102898	2.7968	0.0332562	0.0316926	0.482	0.378102
88	Ra	-	0.193979	0.01786	4.57314	-	-	-	0.117075
89	Ac	7p	0.189993	0.003675	3.98732	0.0258071	0.0240195	0.03	0.0280577
90	Th	6p	0.231765	0.0128623	3.79835	0.0303461	0.0291417	0.0875	0.0770604

DOPPLER ULTRASONIC SYSTEM FOR FLOW MEASUREMENT IN PATIENTS WITH DIABETIC FOOT USING RECONFIGURABLE LOGIC AND WISHBONE ARCHITECTURE

SISTEMA ULTRASONICO DOPPLER PARA LA MEDICIÓN DE FLUJO EN PACIENTES CON PIE DIABÉTICO MEDIANTE EL EMPLEO DE LÓGICA RECONFIGURABLE Y ARQUITECTURA WISHBONE

E. CARRILLO^{a†}, A. JIMÉNEZ^a, E. MORENO^a, L. LEIJA^b, A. VERA^b Y A. RAMOS^c

a) Dpto. Física Aplicada. Instituto de Cibernética, Matemática y Física, La Habana, Cuba; ernesto@icimaf.cu[†]

b) Dpto. de Ingeniería Eléctrica, Sección Bioelectrónica, CINVESTAV, Ciudad México. DF, México

c) Lab. Sistemas Ultrasónicos (CSIC). Serrano 144, 28006 Madrid, España. E-mail: aramos@ia.cetef.csic.es

[†] corresponding author

Recibido 28/3/2016; Aceptado 22/7/2016

The first results in the design of a pulsed Doppler ultrasound system are presented, which aims to detect alterations of diabetic foot cataloged as "high risk", associated with the processes that lead to occlusion of blood vessels. Therefore, measurement of blood flow gives the level of damage in the affected area and the state of the blood vessels, constituting a noninvasive diagnostic test. The system was designed from the classical conceptions of Pulsed Doppler systems and also, incorporates advanced digital design techniques based on hybrid hardware-software implementations (FPGA) on reconfigurable platforms. The analog system architecture is shown and finally, its most outstanding features and the expected results of the design are exposed.

Se presentan los primeros resultados en el diseño de un sistema ultrasónico Doppler Pulsado, que tiene como objetivo detectar alteraciones que cataloguen al pie diabético como de "alto riesgo", vinculadas con los procesos que provocan la oclusión de los vasos sanguíneos. Por tanto, la medición del flujo sanguíneo proporciona el nivel de afectación del área dañada y el estado de los vasos sanguíneos, constituyendo una prueba diagnóstica no invasiva. El sistema se diseñó partiendo de las concepciones clásicas de los sistemas Doppler Pulsados y además, incorpora técnicas avanzadas de diseño digital basadas en implementaciones híbridas hardware-software (FPGA), sobre plataformas reconfigurables. Se muestra la arquitectura analógica del sistema, se dan sus características más sobresalientes y finalmente, se exponen los resultados esperados de dicho diseño.

PACS: pulsed Doppler ultrasonic system, 43.35.Zc, 81.70.Cv. blood vessels occlusion, 43.35.Wa. hardware-software hybrid implementations, 84.40.Lj. reconfigurable platforms 84.40.Lj

I. INTRODUCTION

The Vascular Doppler Ultrasound (VDU) is an advanced, non-invasive technique that not only provides information on the human vascular structure, but is also able to measure blood flow in various parts of the circulatory system related to serious diseases, such as the so called Diabetic Foot. It also helps to determine the resistance of the blood vessels to blood flow, and provides relevant information on the state of them by means of ultrasound, using an ultrasonic sensor which is aligned with the artery or vein to be measured. It constitutes a diagnostic test which evaluates the intensity of blood flow, employing the Doppler effect produced during interaction with the red blood cells. Among the applications of this technique are:

- Decide whether the treatment should be surgical or with drugs.
- Diagnosing thrombosis in the venous system of the legs.
- Checking obstructions in arteries of the neck (carotid) and arteries in legs and arms.

Doppler measurement systems used in medicine can be continuous or pulsed type. The continuous system transmits a continuous ultrasound beam such that the transmission and reception of ultrasound occurs simultaneously in the transducer, which makes it impossible to determine the depth at which the Doppler effect occurs [1,2].

In pulsed systems, a pulse train of short duration is transmitted and received, getting information before transmitting the next pulse train. The main advantage between pulsed Doppler and continuous Doppler consists in obtaining information about the distance to the object being surveyed (the time interval between transmission and reception can be converted into a distance, knowing the speed of ultrasound in the medium in question). It is most often used today for this type of equipment.

The pulsed Doppler systems require of some circuits to enable that signals be transmitted and received at appropriate times and to sample and store the demodulated signals. The ultrasonic transducers used in pulsed units have one piezoelectric element for transmitting and receiving ultrasound [4-6].

This paper describes a system for measuring blood flow by Doppler technique in patients with Diabetic Foot and to make it happen, it is necessary to know the permeability of the blood flow, which is determined by measuring systolic blood pressure (PAS) in arms and ankles. For it, the information from Doppler measurements done in arteries located in the same place is employed.

II. DETERMINATION OF SYSTOLIC BLOOD PRESSURE (PAS)

The permeability of the blood circulation can be obtained by determining systolic blood pressure (PAS) in arms and ankles using a blood pressure cuff and a Doppler equipment. PAS will be measured in both arms and close by the ankles by which the value of ankle brachial index can be obtained.

The procedure is shown below:

1. Maintain the patient at rest for 5 minutes.
2. The measurement is made using the Doppler transducer at an angle of 60° respect to the artery to be measured: the elbow's humeral, in the pedal and the foot posterior tibia.
3. The blood pressure cuff should be inflated to at least 20 mm Hg , in order to obstruct the conduit and then deflated gently (-2 mm Hg/sec) to ensure greater accuracy.
4. Then during deflation, the PAS will be obtained at the time the appearance of the Doppler arterial pulsation is detected.
5. PAS is calculated using the Doppler transducer supported in both brachial arteries (above the elbow) and in pedis and posterior tibial arteries. In both cases, the highest reading values of pressure are selected to calculate the PAS.
6. Then, to obtain the ankle/brachial index (ITB), the highest value of PAS obtained in the ankle is divided by the highest value of PAS obtained in arm:

$$ITB = \frac{\text{Ankle Pressure}}{\text{Arm Pressure}} \quad (1)$$

Arterial insufficiency depending on the ITB is shown in Table 1.

III. SYSTEM DESCRIPTION

The system consists of an 8 MHz ultrasonic Doppler sensor, an analog module, a digital module and a PC. The analog module and the sensor are responsible for the acquisition and pre-processing of the Doppler signal from the measurement made on a blood vessel. The digital module generates the control signals used by the analog module, processes the signal from this module and sends it to a PC via USB port using FPGA technology. The PC is responsible for

receiving the sent signals, process them and finally show the deployment in the display, see Figure 1.

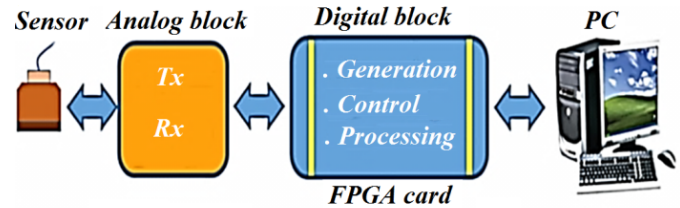


Figure 1. Block diagram of the ultrasonic Doppler system.

Table 1. Arterial Insufficiency

T/B	Disturbance
> 0.5	Severe Vascular Disease
0.5 – 0.8	Moderate Vascular Disease
< 0.9	Suspected Vascular Disease
0.9 – 1.3	Acceptable Range

III.1. Doppler ultrasonic sensor

The ultrasonic sensor is responsible for emit an 8 MHz pulse train to the vascular tissue and then receive echoes containing information from Doppler ultrasound, produced in blood coursing through a vessel, see figure 2. The 8 MHz piezoelectric element has two wire welded on its sides and is adequately glued onto one surface of a piece made of rexolite material, which was previously acoustically designed. The wires are welded to a shielded cable having a connector at its other end.

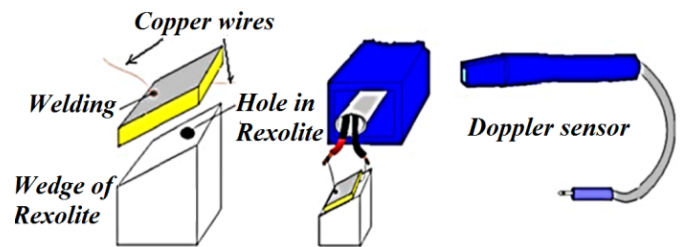


Figure 2. Construction of Doppler ultrasonic sensor.

III.2. Doppler analog module

The analog Doppler module is shown in figure 3 as part of the system and is highlighted with dashed lines. It consists of four main sections: a transmitter, a receiver, two modulators and two bandpass filters. It operates under the known Pulse-echo principle. The transmitting section drives the 8 MHz sensor by means of a pulse train of the same frequency. As a result, the transducer emits an ultrasonic train of the same frequency which interacts with the blood flow through a vessel, corresponding to an artery or a vein, which causes that a Doppler signal be received and amplified by the receiver.

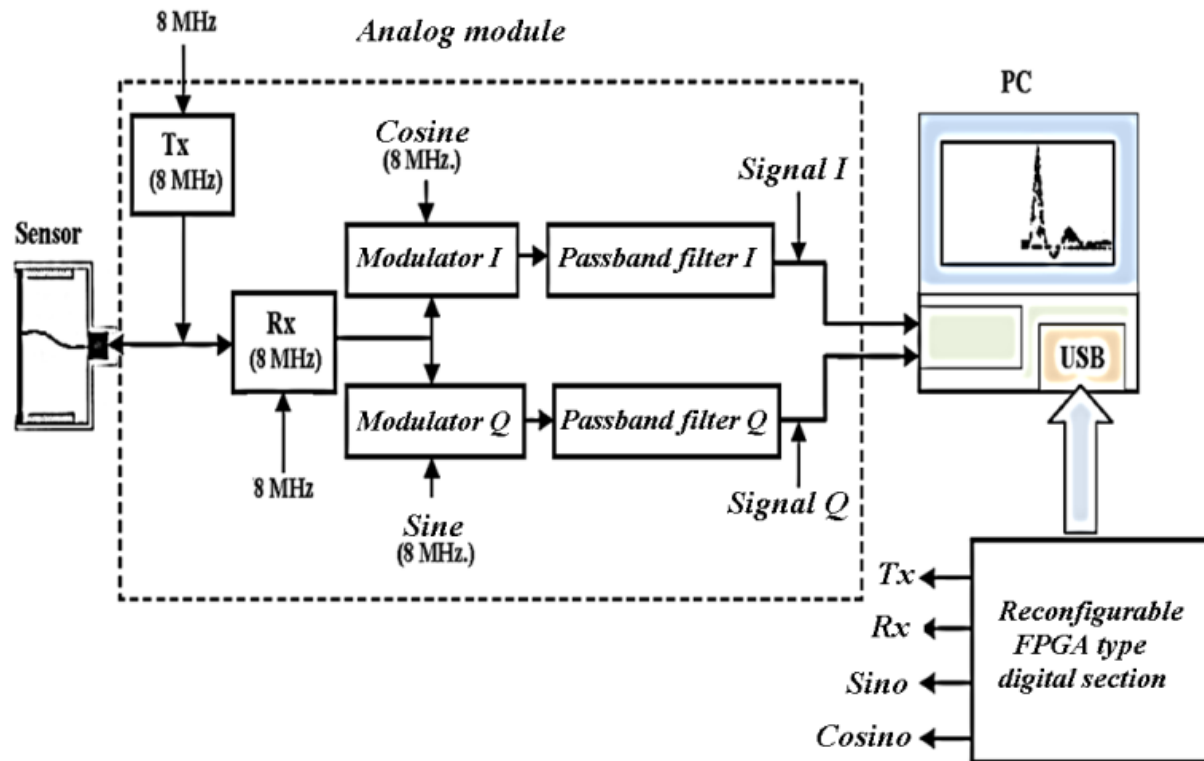


Figure 3. Ultrasonic Doppler system handled by FPGA.

The receiver, connected to the transmitter output, is formed by a tuned input stage and an amplifier stage implemented with a FET transistor. It has a voltage gain of 9.5 dB, wide bandwidth and its output signal is applied to two modulators. The modulators, implemented from a transistor stage have 3 main functions: coupling with the previous stage, mixer and audio amplifier with low pass response. The modulators receive at their emitter inputs the Doppler signal from the receiver, and the base inputs, receive two 8 MHz signals from the digital module, which are shifted 90 degrees and thus is possible to obtain a phase quadrature modulation. The outputs of the modulators are low-pass filtered with cutoff frequencies of 3.3 kHz and a slope of -6 dB/oct., so that, the difference between the input signals is obtained at the output of the modulators.

Finally, these signals at the outputs of the modulators are filtered again by bandpass filters, with cutoff frequencies of 330 Hz and 8 kHz and slopes of 18 dB/oct and -30 dB/oct, respectively, obtaining finally the known signals Q and I, which will be processed in the digital section.

III.3. Digital module to control and processing

The analog module is controlled by a digital module which consists of programmable and reconfigurable FPGA elements, where the corresponding signals for the operation of the analog module are produced, together with the signals that interface with the PC. The LabView program is employed

in the PC to process conveniently the signals acquired from the FPGA, which are shown later in its display.

Wishbone architecture

Digital module implementation is based on the wishbone architecture, developed as an open code computer bus allowing communication among the parts of an integrated circuit, intended to be a logical bus. Its specification is not related to electrical information or a bus topology. It is written in terms of signals, clock cycles or high and low levels. Furthermore, it consists of a specification of openness that allows the user to configure the system based on a predefined set of permissions and prohibitions, see figure 4.

This ambiguity is deliberate as Wishbone is designed to allow designers to combine many designs described in Verilog, VHDL or other logical description languages for EDA. The bus provides a standard way of combining different hardware designs as cores. It fits common bus topologies such as point to point, many to many, hierarchical or switched fabric.

The bus is defined to allow structures of 8, 16, 32 and 64 bits. All the signals are synchronized to the same clock, but the responses of the slaves must be generated in combinational form for maximum performance. It also allows the addition of a tag bus to describe the data.

Wishbone implementation

The digital module was implemented in a Spartan 6 Xilinx FPGA development platform, taking into account its great

functional and reconfigurable advantages. Such a device was used to implement the generation of all control signals: the synchronism and the acquisition of signals by the A/D converter (located in the analog module), to do the processing of Doppler signals (acquired by said A/D converter) and finally, to send such signals to the computer through the USB port.

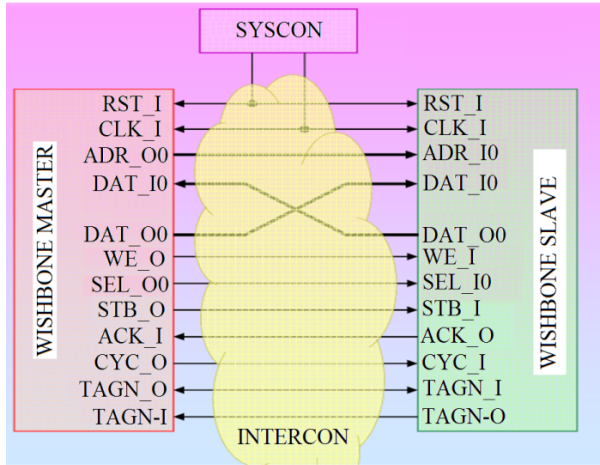


Figure 4. Master-slave Wishbone interface.

To do this, it was used the hardware description language (VHDL) and the Wishbone interface, taking into account their functional and great reconfigurable advantages. These signals were programmed in XILINX ISE 13.1 platform.

Input register of generating control signals module

- *value_ent*: It allows selecting the system working frequencies of 6 and 8 MHz.
- *pulses_number*: It allows the choice and to vary the number of pulses that integrate the signals in phase and in opposite phase to the transmission process.
- *prf_selection*: It allows the choice and variation of the system repetition frequency.
- *ffmuestreo*: It enables to change the sampling rate of the acquisition system.
- *d_delay*: It selects the start of acquisition of the A/D converter.

Control signals generated at the output

To implement the output signals, the control signals generation module was created (Unit_tubes_controller) and implemented in VHDL language, which describes the operation of real electronic devices by means of software. These signals will be responsible for controlling the analog transmitter described above.

Enable signal of ultrasonic transmitter

This signal supplies logic 1 for a given time, allowing the activation of the ultrasonic transmitter belonging to analog

module, see Figure 5.

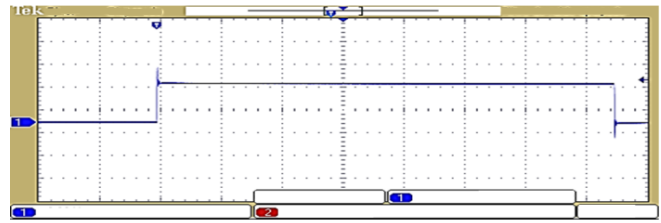


Figure 5. Enable signal of ultrasonic transmitter.

Burst OUT signal to the pulsed Doppler

To obtain the Burst OUT signal, the previously selected frequency of 8 MHz is employed. Initially, the number of pulses of this signal is selected and the value of the repetition frequency is generated.

To generate this signal, the arch_divider_core architecture is used, which is nothing more than a fixed 8 bit counter, where cnt_clock and cnt_countcnt_reset variables are used.

As a result, a fixed repetition frequency in the system is obtained by means of the default value of the variable cnt_count. This means that the system will always have a fixed repetition rate between burst and burst, previously generated.

Then, by means of the architecture_arch_counter_core program, and through 16-bit cnt_count variable, a higher value counter in correspondence with the first counter is achieved, offering the possibility of increasing the repetition frequency. This 16-bit cnt_count value can also be prefixed or selected by the user from a personal computer. In figure 6, the pulsed signal which is applied to the transmitter is shown, where the number of pulses and the repetition frequency were previously selected.

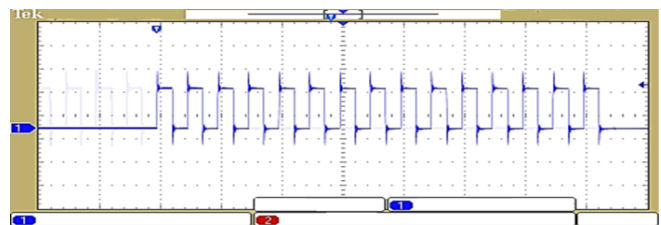


Figure 6. Transmitting 8 MHz pulsed Doppler signal.

Reception_gate signal

This signal is responsible for enabling the receiver during transmission, protecting its first stage from the high voltage. If the transmission mode is continuous, the protection is not required because the transmission occurs with low voltage, see figure 7.

Generated sine and cosine signals

Two 8 MHz signals shifted 90 degrees from each other (sine and cosine), being in phase quadrature, are applied to modulators in the analog module (see figure 8). Then,

they are mixed with the received Doppler signal, occurring a phase quadrature modulation.

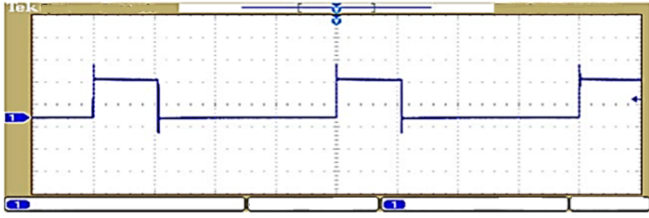


Figure 7. Gate 8 MHz pulsed signal.

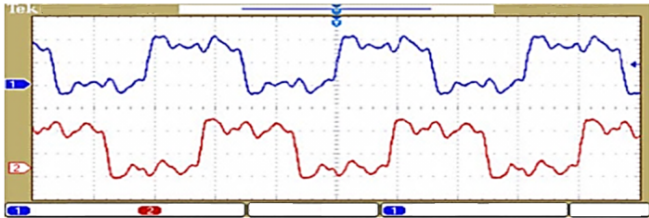


Figure 8. 8 MHz phase quadrature signals.

The signals obtained at the output of the two modulators are fed into low pass filters, located in the analog module, with cutoff frequencies of 7 kHz and slope of -30 dB/oct. The filtered signals, corresponding to the difference between the Doppler signal and the modulating quadrature signals, are in the audible range, known as I and Q signals.

Wishbone communication module

This module is responsible for interconnecting all input and output signals between the Wishbone module and different implemented modules, both for generation and for signal acquisition, see Figure 9. This stage was programmed so that the system starts with default values, that means, when executed, the system pre-sets the values in the main program.

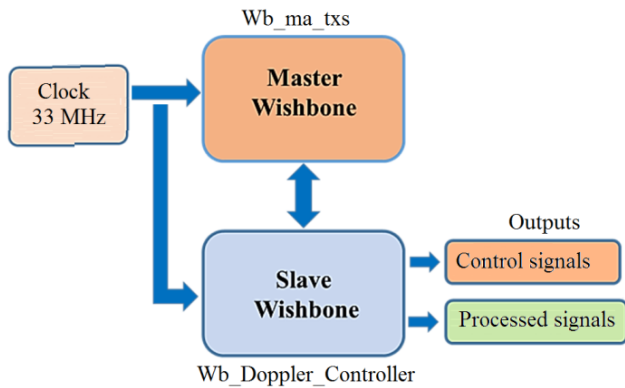


Figure 9. Wishbone implementation.

Subsequently, to run properly the Wishbone interface provides the possibility to change the values of frequency, number of pulses and frequency of repetition, as desired by the user, using a “case” function, programmed into the FPGA. All these changes are executed in real time by a program in a microcomputer (Labview), via the USB port. For this, by means of the program edit, the user can change the desired values at all times.

Signal acquisition module

It is the system acquisition module that drives an A/D converter and is conceived by means of the development of a state machine, which will be in charge of controlling the entire conversion process of the I and Q Doppler signals (conversion in parallel), see figure 10.

Ensures the following aspects:

- The A/D converter clock signal is in high level “1”.
- The initial values are defined for the converter: CNVST is at high level “1” (start conversion).
- The OB_2C signal is prefixed to “1” (define the output signal as binary).
- The Byteswap signal is preset to “1” (selects the A/D converter be 16 Bit in its output).
- The Busy signal in low level “0” (output signal which indicates the device is ready for conversion).

Then, in the next cycle, the CNVST signal takes a low value for a time of 5 ns, telling the A/D that conversion will start. When it begins, the Busy signal changes from logic “0” to “1”, remaining this value until the completion of the conversion and the change to its previous state of “0”, indicates that the data is ready to be acquired. The acquired data (1024 data) is stored in a 16 bit FIFO memory.

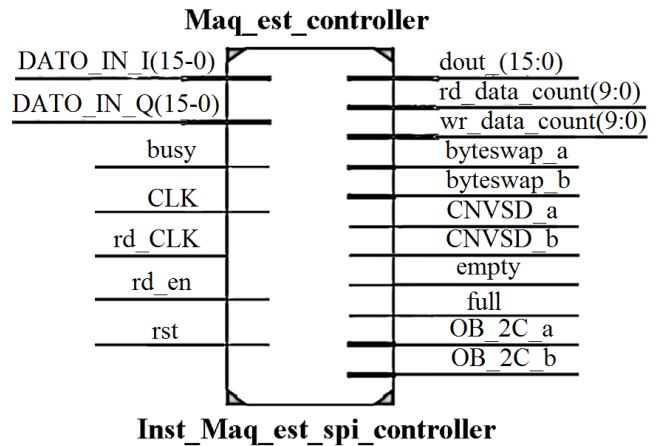


Figure 10. Design of the state machine in the FPGA.

The dram_full ≤ “1” instruction indicates whether the memory is filled and its contain can be sent via USB, (the 1024 byte of data to be processed and then displayed on a personal computer), see figure 11.

USBS6 CESYS module and used FPGA card

This is the FPGA module used in the design with their proper benefits: great number of system channels, a powerful FPGA, higher working frequency, more input-output connectors

and it has a USB port.

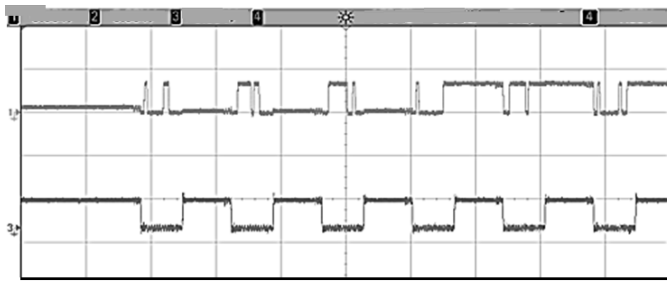


Figure 11. Real time acquisition diagram of AD converter.

Main Characteristics

- XILINX SPARTAN-6™ XC6SLX16-2CSG324C FPGA device.
- USB2.0 CYPRESSTM CY7C68013A controller.
- FPGA configuration using USB2.0, JTAG or SPI-Flash.
- Memory: 16Mb SPI-Flash Numonyx M25P16, 128Mb Quad-SPI-Flash Macronix MX25L12845EMI-10G, 1Gb low-power DDR SDRAM Micron, Technology MT46H64M16LFCK-5.
- Expansion connector, (2x25-Pin standard RM2.54mm header, VG 96-pin connector).
- 48 MHz system clock with external clock option.
- Can be programmed using C++ o VHDL.
- Peripherals: USB to serial UART FTDI FT232R, HEX rotary DIP switch, 3 status.

IV. IMPLEMENTATION OF SOFTWARE DESIGNED IN LABVIEW

In order to view and control the signals coming from the receiver, these are A/D converted and posteriori processed in the FPGA, where the data is sent via USB to a personal computer that runs LabView. Figure 12 shows the front panel which is the screen where the Doppler signals are displayed in real time and the flow value through the vessel [5].

REFERENCES

- [1] P. Atkinson and J. P. Woodcock, Doppler ultrasound and its use in clinical measurement, (Academic Press 1982).
- [2] Safety Statement, International Society of Ultrasound in Obstetrics and Gynecology (ISUOG), Rapid Response Group J.S. Abramowicz (2000).
- [3] D. H. Evans, W. N. McDicken, R. Skidmore, and J. P. Woodcock. Doppler Ultrasound, physics, instrumentation, and clinical applications. (Jonh Wiley & Sons LTD. 1989).
- [4] John G. Abbott, Ultrasound in Med. & Biol 25, 3 (1999).
- [5] J. Prohias "Doppler para evaluación del flujo coronario: Un propósito alcanzable", Ponencia Hospital Ameijeiras. (2004).
- [6] D. H. Evans, and W. N. McDicken, Doppler Ultrasound: Physics, Instrumentation and Signal Processing, (John Wyley, Chichester 2000).
- [7] D. F. García, E. Moreno, M. Fuentes, A. Jiménez. Procesamiento Paralelo en Estimación Espectral De Señales Doppler Ultrasónicas En Instrumentación Médica, Forum Nacional De Ciencia E Tecnología EmSaúde. Campos De Jordao. Brasil pp. 817. (1996).

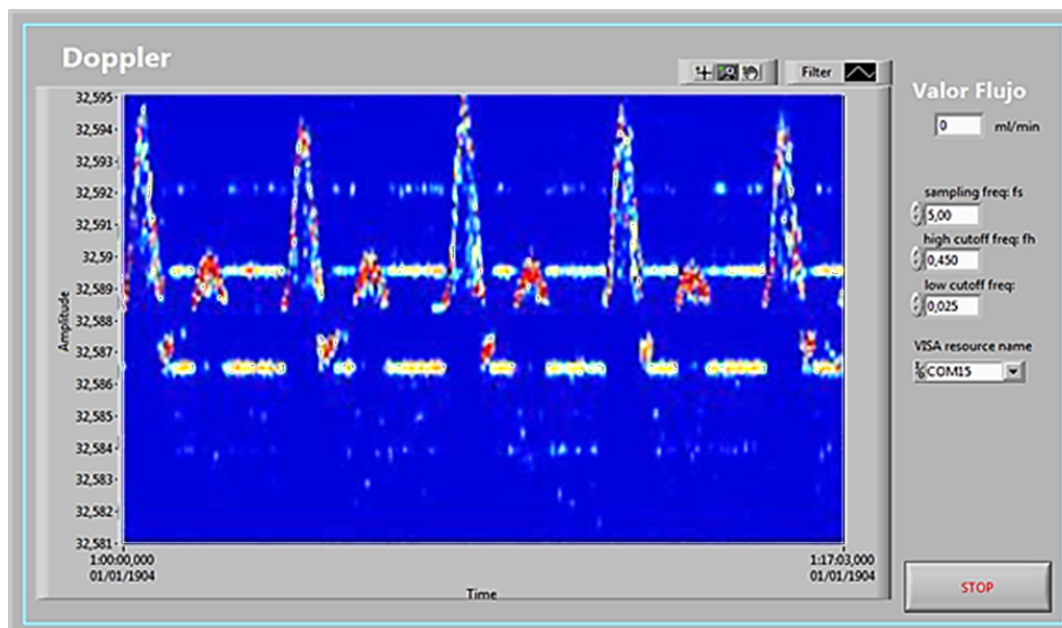


Figure 12. Frontal panel of Doppler system.

ON THE ONSET OF INSTABILITY OF A VISCOELASTIC FLUID SATURATING A POROUS MEDIUM IN ELECTROHYDRODYNAMICS

SOBRE LA APARICIÓN DE INESTABILIDAD PARA UN FLUIDO VISCOELÁSTICO QUE SATURA UN MEDIO POROSO EN LA ELECTROHIDRODINÁMICA

G. C. RANA^{a†}, R. CHAND^b, V. SHARMA^c

a) Department of Mathematics, NSCBM Govt. P. G. College, Hamirpur-177 005, Himachal Pradesh, India; drgcrana15@gmail.com[†]

b) Department of Mathematics, Govt. College Nurgpur, District Kangra, Himachal Pradesh, India

c) Department of Mathematics and Statistics, Himachal Pradesh University, Shimla – 171 005, Himachal Pradesh, India

[†] corresponding author

Recibido 5/7/2016; Aceptado 12/10/2016

In this paper, we study the effect of AC electric field on the onset of electrohydrodynamic instability in a viscoelastic fluid layer saturating a porous medium caused by dielectrophoretic force due to variation in the dielectric constant with temperature. Walters' (model B') fluid model is used to describe the behaviour of a viscoelastic dielectric fluid and for porous medium, Darcy model is employed. The fluid layer is induced by the dielectrophoretic force due to the variation of dielectric constant with temperature. We derive the dispersion relation describing the influence of viscoelasticity, Darcy number and AC electric field by applying linear stability theory and normal mode analysis method. It is observed that Walters' (model B') fluid behaves like an ordinary Newtonian fluid in the stationary convection whereas Darcy number and AC electric field have destabilizing effect on the stationary convection. The present results are in good agreement with the earlier published results.

En este artículo estudiamos el efecto de un campo eléctrico alterno en la aparición de la inestabilidad electrohidrodinámica en una capa de un fluido viscoelástico que satura un medio poroso, causada por la fuerza dielectroforética debido a la variación de la constante dieléctrica con la temperatura. Se usa el modelo de Walter (modelo B') para describir el comportamiento de un fluido dieléctrico viscoelástico y, para el medio poroso, el modelo de Darcy. La capa fluída es inducida por la fuerza dielectroforética debida a la variación de la constante dieléctrica con la temperatura. Derivamos la relación de dispersión que describe la influencia del número de Darcy de la viscoelasticidad y el campo eléctrico alterno aplicando la teoría de estabilidad lineal y el método de análisis de modo normal. Se observa que el fluido que sigue el modelo B' se comporta como un fluido Newtoniano ordinario en la convección estacionaria, mientras que el número de Darcy y el campo eléctrico alterno tienen un efectos desestabilizante sobre la convección estacionaria. Estos resultados están en concordancia con resultados previamente publicados.

PACS: Electrohydrodynamics, 47.65.-d, non-Newtonian, 47.50.-d, fluid dynamics, 47.53.+n, through porous media, 47.56.+r

I. INTRODUCTION

The study of Newtonian fluid heated from below saturating a porous medium has attracted many researchers for the last few decades as it has various applications in geophysics, food processing, oceanography, soil sciences, ground water hydrology, astrophysics etc. Chandrasekher [1] discussed thermal instability of Newtonian fluid under the various assumptions of hydrodynamics and hydromagnetics. A good account of thermal instability problems in a porous medium is given by Wooding [2], Ingham and Pop [3], Vafai and Hadim [4] and Nield and Bejan [5].

Recently, the study of electrohydrodynamic instability in dielectric fluid attracts many researchers because it has various applications in climatology, oceanography, EHD enhanced thermal transfer, EHD pumps, EHD in microgravity, micromechanic systems, drug delivery, micro-cooling system, nanotechnology etc. Chen *et al.* [6] discussed the applications of electrohydrodynamics in brief. They said that EHD heat transfer came out as an alternative method to enhance heat transfer, which is known as electrothermohydrodynamics (ETHD). Many

researchers have been studied the effect of AC or DC electric field on natural convection in a horizontal dielectric fluid layer by taking different types of fluids. The onset of electrohydrodynamic convection in a horizontal layer of dielectric fluid was studied by Landau [7], Robert [8], Castellanos [9], Lin [10], Gross and Porter [11], Turnbull [12], Maekawa *et al.* [13], Smorodin and Velarde [14], Galal [15], Rudraiah and Gayathri [16] and Chang *et al.* [17]. Takashima and Ghosh [18] studied the electrohydrodynamic instability in a viscoelastic liquid layer and found that oscillatory modes of instability exist only when the thickness of the liquid layer is smaller than about 0.5 mm and for such a thin layer the force of electrical origin is much more important than buoyancy force while Takashima and Hamabata [19] studied the stability of natural convection in a vertical layer of dielectric fluid in the presence of a horizontal AC electric field.

In these fluids, an applied temperature gradient produces non-uniformities in the electrical conductivity and the variation of the electrical conductivity of the fluid with temperature produces free charges in the bulk of the fluid. These free charges interacting with applied or induced

electric field produce a force that causes fluid motion. On the other hand, when there is variation in dielectric permittivity and the electric field is intense then the polarization force which is induced by the non-uniformity of the dielectric constant causes fluid motion. In either case, convection can occur in a dielectric fluid layer even when the temperature gradient is stabilizing.

Reiner [20] and Walters' [21] developed the non-linear constitutive equations for non-Newtonian compressible and incompressible fluid respectively. Green [22] was the first who studied the problem of convective instability of a viscoelastic fluid heated from below while Vest and Arpaci [23] studied the problem of overstability of a viscoelastic fluid. With the growing importance of non-Newtonian fluids having applications in geophysical fluid dynamics, chemical technology and petroleum industry attracted widespread interest in the study on non-Newtonian fluids. One such type of fluids is Walters' (model B') elasto-viscous fluid having relevance in chemical technology and industry. A good account of thermal instability problems of Walters' (Model B') fluid in porous medium has been studied by Sharma and Rana [24], Gupta and Aggarwal [25], Rana and Kumar [26], Rana and Jamwal [27], Rana *et al.* [28], Rana and Chand [29] and Rana *et al.* [30].

The main aim of this paper is to study the effect of uniform AC electric field and Darcy number on the onset of instability of viscoelastic Walters' (model B') fluid layer. To the best of my knowledge, this problem has not been studied as yet.

II. MATHEMATICAL MODEL

We consider an infinite horizontal layer of an incompressible Walters' (model B') viscoelastic fluid of thickness d saturating a porous medium, bounded by the planes $z = 0$ and $z = d$. The fluid layer is acted upon by a gravity force $g = (0, 0, -g)$ aligned in the z direction and the uniform vertical AC electric field applied across the layer. The lower surface is grounded and the upper surface is kept at an alternating potential (60 Hz) whose root mean square value is ϕ . The temperature T at the lower and upper boundaries is assumed to take constant values T_0 and T_1 ($< T_0$) respectively. The Darcy law is assumed to hold and the Oberbeck-Boussinesq approximation is employed (see Figure 1).

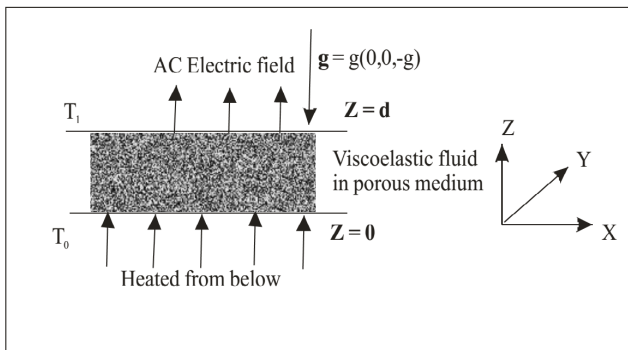


Figure 1. Physical configuration of the problem

III. GOVERNING EQUATIONS

Let ρ , μ , μ' , ϕ , p , K , $\mathbf{q}(u, v, w)$, \mathbf{g} , T , κ , A and \mathbf{E} denote respectively, the density, viscosity, viscoelasticity, medium porosity, pressure, dielectric constant, Darcy-velocity vector, acceleration due to gravity, temperature, thermal diffusivity, ratio of heat capacity and the root-mean-square value of electric field. The equations of conservation of mass, momentum and thermal energy for Walters' (model B') elastic-viscous fluid (Chandrasekhar [1], Walters' [21], Takashima and Ghosh [18], Sharma and Rana [24], Robert [8] and Rana *et al.* [30]) are

$$\nabla \cdot \mathbf{q} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\rho}{\phi} \frac{d\mathbf{q}}{dt} = -\nabla P + \rho \mathbf{g} - \frac{1}{k_1} \left(\mu - \mu' \frac{\partial}{\partial t} \right) \mathbf{q} - \frac{1}{2} (\mathbf{E} \cdot \mathbf{E}) \nabla K, \quad (2)$$

$$A \frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{q} \cdot \nabla) T = \kappa \nabla^2 T, \quad (3)$$

where $d/dt = (\partial/\partial t) + (1/\phi)(\mathbf{q} \cdot \nabla)$ stands for convection derivative and

$$P = p - \frac{\rho}{2} \frac{\partial K}{\partial \rho} (\mathbf{E} \cdot \mathbf{E}) \quad (4)$$

is the modified pressure.

Since the driving force (dielectrophoretic force) is strictly speaking periodic, the stationary state solution to the system 1-4 is not time independent. To keep it simple, neglecting the nonlinearities in the system 1-4 a rough estimate of the order of magnitude of the terms involving time derivatives gives

$$q \approx q_0, \quad \rho \frac{\partial q}{\partial t} = 2\rho\omega q_0, \quad \mu' \frac{\partial q}{\partial t} = 2\mu'\omega q_0 \quad \text{and} \quad A \frac{\partial T}{\partial t} = 2A\omega T_0,$$

where q_0 and T_0 are respectively, a characteristic velocity and temperature of the problem, and ω is the frequency of the forcing.

The Coulomb force term $\rho_e \mathbf{E}$, where ρ_e is the free charge density, is of negligible order as compared with the dielectrophoretic force term for most dielectric fluids in a 60-Hz AC electric field. Thus, we retain only the dielectrophoretic term, *i.e.*, last term in equation 2 and neglect the Coulomb force term. Furthermore, the electrical relaxation times of most dielectric liquids appear to be sufficient long to prevent the build up of free charge at standard power line frequencies. At the same time, dielectric loss at these frequencies is very low that it makes no significant contribution to the temperature field. It is also seen that the dielectrophoretic force term depends on $(\mathbf{E} \cdot \mathbf{E})$ rather than \mathbf{E} . As the variation of \mathbf{E} is so speedy, the root-mean-square value of \mathbf{E} is used as effective value in determining the motion of fluids. So we can consider the AC electric field as the DC electric field whose strength is equal to the root mean square value of the AC electric field.

A charged body in an electric field tends to move along the electric field lines and impart momentum to the surrounding fluid. The Maxwell equations are

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0, \quad (5)$$

$$\nabla \cdot (K\mathbf{E}) = 0.$$

In view of Eq. 5, \mathbf{E} can be expressed as

$$E = -\nabla V, \quad (7)$$

where V is the root mean square value of electric potential. The dielectric constant is assumed to be linear function of temperature and is of the form

$$K = K_0[1 - \gamma(T - T_0)], \quad (8)$$

where $\gamma > 0$, is the thermal coefficient of expansion of dielectric constant and is assumed to be small.

The equation of state is

$$\rho = \rho_0[1 - \alpha(T - T_0)], \quad (9)$$

where α is coefficient of thermal expansion and the suffix zero refers to values at the reference level $z = 0$.

IV. BASIC STATE

The basic state of the system is taken to be quiescent layer (no settling) and is given by

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}_b(z), \quad P = P_b(z), \quad T = T_b(z), \quad \mathbf{E} = \mathbf{E}_b(z), \quad (10)$$

$$K = K_b(z), \quad \text{and} \quad \rho = \rho_b(z),$$

where the subscript b denotes the basic state.

Substituting equations given in 10 in Eqs. 1–9, we obtain

$$0 = -\nabla \frac{P_b}{\rho_0} + \frac{\rho_b(z)}{\rho_0} \mathbf{g} - \frac{1}{2\rho} \mathbf{E}^2 \nabla K, \quad (11)$$

$$\frac{\partial^2 T_b(z)}{\partial z^2} = 0, \quad (12)$$

$$K_b(z) = K_0[1 - \gamma(T_b - T_0)], \quad (13)$$

$$\rho_b(z) = \rho_0[1 - \alpha(T_b - T_0)], \quad (14)$$

$$\nabla \cdot (K_b \mathbf{E}_b) = 0. \quad (15)$$

Solving Eq. 12 by using the following boundary conditions

$$T_b(z) = T_0 \text{ at } z = 0 \text{ and } T_b(z) = T_1 \text{ at } z = 1, \quad (16)$$

we obtain

$$T_b = T_0 - \Delta T \frac{z}{d}. \quad (17)$$

In view of Eq. 15 and noting that $E_{bx} = E_{by} = 0$, it follows that

$$K_b E_{bz} = K_0 E_0 = \text{constant (say)}. \quad (18)$$

Then

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_b(z) = \frac{E_0}{1 + \gamma \Delta T \frac{z}{d}}.$$

Hence

$$V_b(z) = -\frac{E_0 d}{\gamma \Delta T} \log(1 + \gamma \Delta T \frac{z}{d}), \quad (20)$$

$$\text{where } E_0 = -\frac{V_1 \gamma \Delta T / d}{\log(1 + \gamma \Delta T)}, \quad (21)$$

is the root-mean-square value of the electric field at $z = 0$.

V. PERTURBATIONS SOLUTIONS

To study the stability of the system, we superimposed infinitesimal perturbations on the basic state, so that

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}', \quad T = T_b + T', \quad \mathbf{E} = \mathbf{E}_b + \mathbf{E}', \quad (22)$$

$$\rho = \rho_b + \rho', \quad K = K_b + K', \quad \text{and} \quad P = P_b + P',$$

where q', T', E', ρ', K' and P' be the perturbations in $q, T, \mathbf{E}, \rho, K$ and P respectively. Substituting Eq. 10 in Eqs. 1–9, linearizing the equations by neglecting the product of primed quantities, eliminating the pressure from the momentum Eq. 2 by operating curl twice and retaining the vertical component and non-dimensionalizing the resulting equations by

$$(x^*, y^*, z^*) = \left[\frac{x, y, z}{d} \right], \quad q^* = \frac{d}{\kappa} q, \quad t^* = \frac{\kappa}{d^2} t,$$

$$T^* = \frac{1}{\Delta T} T \quad \text{and} \quad V^* = \frac{1}{\gamma E_0 \Delta T d} V.$$

Neglecting the asterisk for simplicity, we obtain the linear stability equations in the form

$$\left[\frac{1}{Pr} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{Da} \left(1 - F \frac{\partial}{\partial t} \right) \nabla^2 \right] \nabla^2 w = Ra_t \nabla_h^2 T + Ra_e \nabla_h^2 \left(T - \frac{\partial V}{\partial z} \right), \quad (23)$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - \nabla^2 \right] T = w, \quad (24)$$

$$\nabla^2 V = \frac{\partial T}{\partial z}, \quad (25)$$

where we have used dimensionless parameters as:

$$Pr = \frac{\nu \phi}{\kappa}, \quad F = \frac{\mu'}{\mu} \quad \text{and} \quad Da = \frac{k_1}{d^2} \quad (26)$$

$$Ra_t = \frac{g \alpha \Delta T d^3}{\nu \kappa} \quad (27)$$

$$Ra_e = \frac{\gamma^2 K_0 E_0^2 (\Delta T)^2 d^2}{\mu \kappa} \quad (28)$$

The parameter Pr is the Prandtl number, F is the viscoelasticity parameter, Da is the Darcy number, Ra_t is the familiar thermal Rayleigh number and Ra_e is the AC electric Rayleigh number.

Now we assume that the temperature at the boundaries is kept fixed, the fluid layer is confined between two boundaries. The boundary conditions appropriate (Chandrasekhar [2], Takashima and Ghosh [18], Rana and Jamwal [27] and Rana *et al.* [30] to the problem are

$$w = \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} = \frac{\partial V}{\partial z} = 0, \quad T_0 \quad \text{or} \quad DT = 0. \quad (29)$$

VI. LINEAR STABILITY ANALYSIS

Using normal mode analysis method, we assume that the perturbation quantities have x , y and t dependence of the form

$$[w, T, V] = [W(z), \Theta(z), \Phi(z)] \exp(ilx + imy + \sigma t), \quad (30)$$

where l and m are the wave numbers in the x and y direction, respectively, and σ is the complex growth rate of the disturbances.

Substituting Eq. 30 in Eqs. 23 – 25 and 29, we get

$$\left[\frac{\omega}{Pr} + \frac{1}{Da}(1 - F\sigma) \right] (D^2 - a^2)W = -Ra_t a^2 \Theta + Ra_e a^2 (\Theta - D\Phi), \quad (31)$$

$$[A\omega - (D^2 - a^2)]\Theta = W, \quad (32)$$

$$\begin{bmatrix} \left[\frac{\omega}{Pr} + \frac{1}{Da}(1 - F\sigma) \right] J^2 & -a^2(Ra_t + Ra_e) & -Ra_e a^2 \pi \\ -1 & A\sigma + J^2 & 0 \\ 0 & \pi & J^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} W_0 \\ \Theta_0 \\ \Phi_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{where } J^2 = \pi^2 + a^2 \text{ is the total wave number.} \quad (36)$$

The linear system 36 has a non-trivial solution if and only if

$$\begin{vmatrix} \left[\frac{\omega}{Pr} + \frac{1}{Da}(1 - F\sigma) \right] J^2 & -a^2(Ra_t + Ra_e) & -Ra_e a^2 \pi \\ -1 & A\sigma + J^2 & 0 \\ 0 & \pi & J^2 \end{vmatrix} = 0,$$

which yields

$$Ra_t = \frac{J^2(J^2 + A\sigma)}{a^2} \left[\frac{\sigma}{Pr} + \frac{1}{Da}(1 - \sigma F) \right] - \frac{a^2}{J^2} Ra_e. \quad (37)$$

Eq. 37 is the dispersion relation accounting for the effect of Prandtl number, electric Rayleigh number, Darcy number and kinematic viscoelasticity parameter in a layer of Walters' (model B') viscoelastic dielectric fluid.

VII. STATIONARY CONVECTION

For stationary convection, putting $\sigma = 0$ in equation 37 reduces it to

$$Ra_t = \frac{(\pi^2 + a^2)^2 Da^{-1}}{a^2} - \frac{a^2}{\pi^2 + a^2} Ra_e. \quad (38)$$

Eq. 38 expresses the thermal Rayleigh number as a function of the dimensionless resultant wave number a , the parameters electric Rayleigh number and Darcy number Da . It is found that the kinematic viscoelasticity parameter F vanishes with ω and the Walters' (model B') viscoelastic dielectric fluid behaves like an ordinary Newtonian dielectric fluid. Eq. 38 is in good agreement with the equation obtained by Roberts [8].

In the absence of AC electric field (i. e., when $Ra_e = 0$), Eq. 38 reduces to

$$Ra_t = \frac{(\pi^2 + a^2)^2 Da^{-1}}{a^2}. \quad (39)$$

$$(D^2 - a^2)\Phi = D\Theta, \quad (33)$$

$$W = D^2 W = D\Phi = 0, \quad \Theta = 0, \quad \text{or } D\Phi = 0, \quad (34)$$

where $a^2 = l^2 + m^2$ and $D = d/dz$.

Eqs. 31 – 33 form an eigenvalue problem for Ra_t or Ra_e and σ with respect to the boundary conditions 34.

We assume the solution to W , Θ , Φ and Z of the form

$$W = W_0 \sin \pi z, \quad \Theta = \Theta_0 \sin \pi z \quad \text{and} \quad \Phi = \Phi_0 \sin \pi z, \quad (35)$$

which satisfy the boundary conditions of Eq. 34. Substituting Eq. 35 into Eqs. 31 – 33, we obtain the following matrix equation

To study the effect of AC electric field on electrohydrodynamic stationary convection, we examine the behaviour of $\partial Ra_t / \partial Ra_e$ analytically. From Eq. 38, we obtain

$$\frac{\partial Ra_t}{\partial Ra_e} = -\frac{a^2}{\pi^2 + a^2}, \quad (40)$$

which is negative implying thereby AC electric field hastens the electroconvection, implying thereby AC electric field has destabilizing effect on the system which is in an agreement with the results derived by Takashima and Ghosh [18] and Rana *et al.* [30]. Also Eq. 38 yields

$$\frac{\partial Ra_t}{\partial Da} = -\frac{(\pi^2 + a^2)^2 Da^{-2}}{a^2}, \quad (41)$$

which is negative implying thereby Darcy number hastens the electroconvection, implying thereby Darcy number has destabilizing effect on the system which is in good agreement with the results derived by Sharma and Rana [24], Gupta and Aggarwal [25], Rana and Kumar [26], Rana and Jamwal [27] and Rana *et al.* [30].

The dispersion relation 38 is analysed numerically. Graphs have been plotted by giving some numerical values to the parameters, to depict the stability characteristics.

In Figure 2, the thermal Rayleigh number Ra_t is plotted against dimensionless wave number a for different values of electric Rayleigh number Ra_e as shown. This shows that as Ra_e increases the thermal Rayleigh number Ra_t decreases. Thus AC electric field has destabilizing effect on stationary convection which is in good agreement with the result obtained analytically from Eq. 40.

In Figure 3, the thermal Rayleigh number Ra_t is plotted against dimensionless wave number a for different values of Darcy number Da as shown. This figure depicts that as Darcy number Da increases the thermal Rayleigh number Ra_t

decreases. Therefore, Darcy number has destabilizing effect on the stationary convection which is in good agreement with the result obtained analytically from Eq. 41.

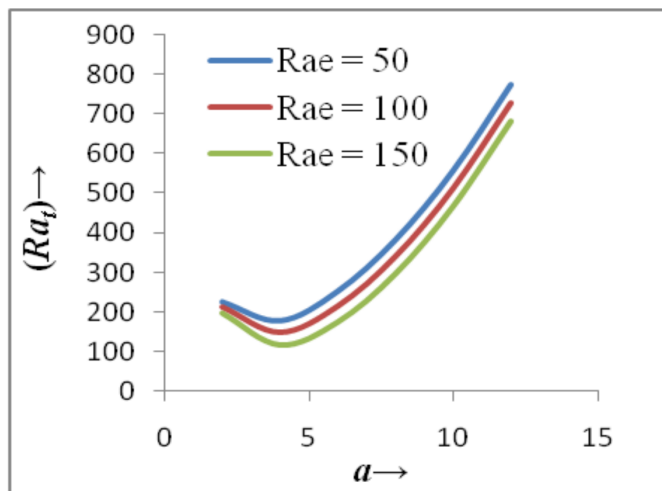


Figure 2. Dependence of the thermal Rayleigh number Ra_t on the wave number a while varying Ra_e .

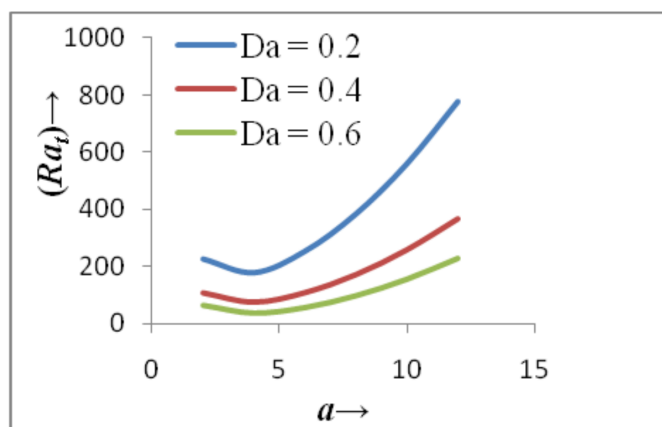


Figure 3. Dependence of the thermal Rayleigh number Ra_t on the wave number a varying Da .

VIII. CONCLUSIONS

The effect of AC electric field on the onset of instability of Walters' (model B') viscoelastic dielectric fluid layer heated from below saturating a porous medium has been studied for the case of free-free boundaries by using linear stability analysis based on normal modes. For the case of stationary convection, the non-Newtonian electrohydrodynamic Walters' (model B') viscoelastic dielectric fluid behaves like an ordinary Newtonian fluid. AC electric field and Darcy number both hastened the onset of electrohydrodynamic stationary convection as $\partial Ra_t / \partial Ra_e$ and $\partial Ra_t / \partial Da$ indicating that the thermal Rayleigh number Ra_t is decreasing function of both electric Rayleigh number Ra_e and Darcy number Da . Hence, AC electric field and Darcy number both have destabilizing effect on the stationary convection.

IX. ACKNOWLEDGEMENTS

Authors would like to thank the learned referees for their critical comments and suggestions for the improvement of quality of the paper. Authors also thank the worthy editor for his valuable suggestions.

REFERENCES

- [1] S. Chandrasekhar, Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability, (Dover Publication, New York 1981).
- [2] R. A. Wooding, Rayleigh instability of a thermal boundary layer in flow through a porous medium. *Journal of Fluid Mechanics*, 9, 183-192 (1960).
- [3] D. D. Ingham and I. Pop, Transport Phenomena in Porous Media, (Elsevier, New York 1981).
- [4] K. Vafai and H.A. Hadim, Hand Book of Porous Media, (Mureel Decker, New York 2000).
- [5] D. A. Nield and A. Bejan, Convection in Porous Medium, (Springer, New York 2006).
- [6] X. Chen, J. Cheng and X. Yin, Advances and applications of electrohydrodynamics. *Chinese Science Bulletin*, 48, 1055-1063 (2003).
- [7] L. D. Landau, Electrodynamics of Continuous Media, (New York, Oxford 1960).
- [8] P.H. Roberts, Electrohydrodynamic convection. *Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*, 22: 211-220 (1969).
- [9] A. Castellanos, Electrohydrodynamics (Springer-Verlag Wien, New York 1998).
- [10] H. Lin, Electrokinetic instability in microchannel flows: a review. *Mech. Res. Comm.*, 36, 33-38 (2009).
- [11] M. J. Gross and J.E. Porter, Electrically induced convection in dielectric liquids. *Nature*, 212, 1343-1345 (1966).
- [12] R. J. Turnbull, Effect of dielectrophoretic forces on the Be'nard instability. *Phys. Fluids*, 12, 1809-1815 (1969).
- [13] T. Maekawa, K. Abe and I. Tanasawa, Onset of natural convection under an electric field. *Int. J. Heat Mass Trans.*, 35, 613-621 (1992).
- [14] B.L. Smorodin, Stability of plane flow of a liquid dielectric in a transverse alternating electric field. *Fluid Dynamics*, 36, 548-555 (2001).
- [15] M. M. Galal, Electrohydrodynamic instability if two superposed viscous miscible streaming liquids. *J. Electrostatics*, 40, 185-190 (1997).
- [16] N. Rudraiah and M.S. Gayathri, Effect of thermal modulation on the onset of electrothermoconvection in a dielectric fluid saturated porous medium. *ASME Journal of Heat Transfer*, 131, 101009-101015 (2009).
- [17] M. H. Chang, A.C. Ruo and F. Chen, Electrohydrodynamic instability in a horizontal fluid layer with electrical conductivity gradient subject to a weak shear flow. *J. Fluid Mech.*, 634, 191-215 (2009).
- [18] M. Takashima and A.K. Ghosh, Electrohydrodynamic instability in a viscoelastic liquid layer. *J. Phys. Soc. Japan*, 47, 1717-1722 (1979).

- [19] M. Takashima and H. Hamabata, The stability of natural convection in a vertical layer of dielectric fluid in the presence of a horizontal AC electric field. *J. Phys. Soc. Japan*, 53,1728-1736 (1984).
- [20] M. Reiner, A mathematical theory of dilatancy. *American Journal of Mathematics*, 67, 350–362 (1945).
- [21] K. Walters', The solution of flow problems in the case of materials with memory. *J. Mecanique*, 1, 469-778 (1962).
- [22] P. Green, Convective instability of viscoelastic fluid heated from below. *Phy. Fluids*, 11, 1410, (1968).
- [23] C. M. Vest and V. Arpaci, Overstability of viscoelastic fluid heated from below. *J. Fluid Mech.*, 36, 613, (1969).
- [24] V. Sharma and G.C. Rana, Stability of Walters' (Model B') superposed fluid in porous medium. *Jnanabha*, 29, 123-136 (1999).
- [25] U. Gupta and P. Aggarwal, Thermal instability of compressible Walters' (model B') fluid in the presence of hall currents and suspended particles. *Thermal Science*, 15, 487-500 (2011).
- [26] G. C. Rana and S. Kumar, Thermal instability of Walters' (Model B') elastico-viscous rotating fluid permitted with suspended particles and variable gravity field in porous medium. *Engineering Transactions*, 60, 55-68 (2012).
- [27] G.C. Rana and H. S. Jamwal, Hydromagnetic thermal instability of Walters' (Model B') rotating fluid permeated with suspended particles in porous medium. *Studia Geotechnica et Mechanica*, 2013. XXXV, 75-88 (2013).
- [28] G. C. Rana, S. K. Kango and K. Chadha, Magneto-thermal convection in Walters'(model B') elastico-viscous fluid saturated by a Darcy-Brinkman porous medium. *Engineering Mechanics*, 21, 425–435 (2014).
- [29] G. C. Rana and R. Chand, Rayleigh-Be'nard convection in an elastico-viscous Walters' (model B') nanofluid layer. *Bulletin of the Polish Academy of Sciences-Technical Sciences*, 63, 235-244 (2015).
- [30] G. C. Rana, R. Chand and D. Yadav, The onset of electrohydrodynamic instability of an elastico-viscous Walters' (Model B') dielectric fluid layer, *FME Transactions*, 43,154-160 (2015).

INTRUDER PENETRATION IN GRANULAR MATTER STUDIED BY LOCK-IN ACCELEROMETRY

PENETRACIÓN DE INTRUSOS EN UN MEDIO GRANULAR ESTUDIADA MEDIANTE ACELEROMETRÍA LOCK-IN

L. ALONSO-LLANES^a, G. SÁNCHEZ-COLINA^a, E. MARTÍNEZ^a, A. J. BATISTA-LEYVA^{a,b}, R. TOUSSAINT^c AND E. ALTSHULER^{a†}

a) Group of Complex Systems and Statistical Physics, Physics Faculty, University of Havana, 10400 Havana, Cuba

b) Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas, 10400 La Habana, Cuba; ealtshuler@fisica.uh.cu[†]

c) Institut de Physique du Globe de Strasbourg (IPGS), Ecole et Observatoire des Sciences de la Terre (EOST), University of Strasbourg/CNRS, 67084 Strasbourg, France

† corresponding author

Recibido 31/8/2016; Aceptado 16/10/2016

Understanding the penetration dynamics of intruders in granular beds is relevant not only for fundamental physics, but also for geophysical processes and construction on sediments or granular soils in areas potentially affected by earthquakes. In this work, we use Lock-in accelerometry to study the penetration of passive intruders into quasi-2D granular matter fluidized by lateral shaking. We observed that there are two well-defined stages in the penetration dynamics as the intruder sinks into the granular material.

La descripción de la dinámica de penetración de intrusos en medios granulares no solo es relevante para la Física sino también para procesos geofísicos y ramas de la industria, en particular la construcción en zonas de terremotos. En el presente trabajo utilizamos la técnica de Acelerometría Lock-in para estudiar la penetración de intrusos pasivos en un medio granular cuasi-bidimensional fluidizado mediante agitación lateral. Esta técnica demuestra que existen dos dinámicas de penetración bien definidas en la medida que el intruso se hunde en el medio granular.

PACS: 45.70.-n, 45.70.Mg, 07.07.Df, 07.50.Qx

By applying an external oscillatory force it possible to find a transition from a solid phase to a liquid phase in a granular media [1]. Such effect produces the loss of solidity of the material and causes a passive object laying on its surface to sink, tilt, or shift laterally [1]. This fluidization has a destructive effect during earthquakes because the buildings loss stability and eventually collapse [2-4]. Due to that earthquakes are one of the most destructive natural hazards affecting the social and economic structures of man. Although they can not be forecasted, their magnitude and after-effects can be minimized [2]. In this paper we propose an experimental technique aimed at understanding the effects of fluidization in order to reach that goal.

the cell there is a horizontal hose with 30 holes of 0.5 mm diameter each, through which is possible inject air into the granular system. The cell is able to oscillate laterally using an electromagnetic shaker with an amplitude of 1.5 cm and a maximum frequency of $\nu = 6$ Hz. Released on the granular system there is an intruder, a squared parallelepiped of 40 ± 0.3 mm side, 17 ± 0.3 mm thickness, and a weight of 51 ± 1 g, whose sinking is followed by a digital camera Hero2 that moves synchronously with the Hele-Shaw cell. Two 3-axis accelerometers MMA7456L are fixed to the Hele-Shaw cell (labeled Ref) and inside of the intruder (labeled Probe) [14].

While in quasi-2D systems the penetration of an intruder can be followed by means of a video camera [5-7], in the case of 3D systems of non-transparent grains this is not possible. Wireless accelerometry has been used in a few occasions to quantify, as far as we know, the sinking dynamics of an intruder [9-12]. In this note we use a method called Lock-in Accelerometry (LIA), previously reported by our group in order to study the penetration dynamics of a passive intruder into a laterally shaken Hele-Shaw cell. [8]. As a result, we are able to establish two well-defined stages in the dynamics of penetration of an intruder into shaken granular matter, as the penetration depth increases.

Figure 1 shows the experimental setup which consists in a Hele-Shaw cell with a gap of 21.4 ± 0.2 mm filled up with polydisperse spherical particles with 0.7 ± 0.1 mm of average size and effective density of 0.715 g/cm³. At the bottom of

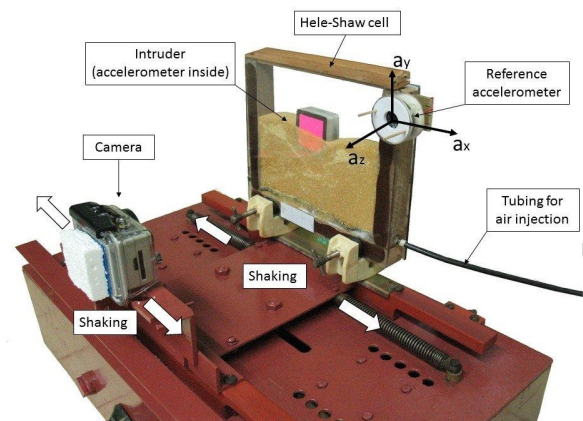


Figure 1. Experimental setup for quasi-2D measurements. Both the Hele-Shaw cell and the camera are synchronously shaken in the lateral direction. Accelerometers attached to the Hele-Shaw cell and the intruder bring the key information to quantify the sinking dynamics

A typical experiment consists in injecting air into the granular system for 10 seconds ensuring reproducible initial conditions. Later the intruder (with the Probe accelerometer inside) is released on the free surface of the bed. Then the data acquisition from the camera and accelerometers are activated and lastly the electromagnetic shaker and the air injection systems are started at the same time until the sinking process ends.

The essence of the technique *LIA* (Lock-In Accelerometry) [8] is the combined use of the information from the accelerometer fixed to the Hele-Shaw cell (Ref) and from the accelerometer inside of the intruder (Probe). Then, the experimental parameter used to study the sinking process is the correlation between the horizontal accelerations from both accelerometers. To calculate the correlation it is used a modification of the Pearson's correlation coefficient aimed at decreasing the noise in the output that consist in calculating the evolution of the Pearson's coefficient within time intervals of size D , each one starting at moment k , as follows:

$$r(k) = \frac{\sum_{i=k}^{k+D} a_{x,R}(i) a_{x,P}(i)}{\left[\sum_{i=k}^{k+D} (a_{x,R}(i))^2 \sum_{i=k}^{k+D} (a_{x,P}(i))^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \quad (1)$$

where $a_{x,R}$ and $a_{x,P}$ represent the horizontal accelerations of the Reference and the Probe, respectively. i represents the sampled time index and N is the total number of experimental data points (k runs from 1 to $N - D$).

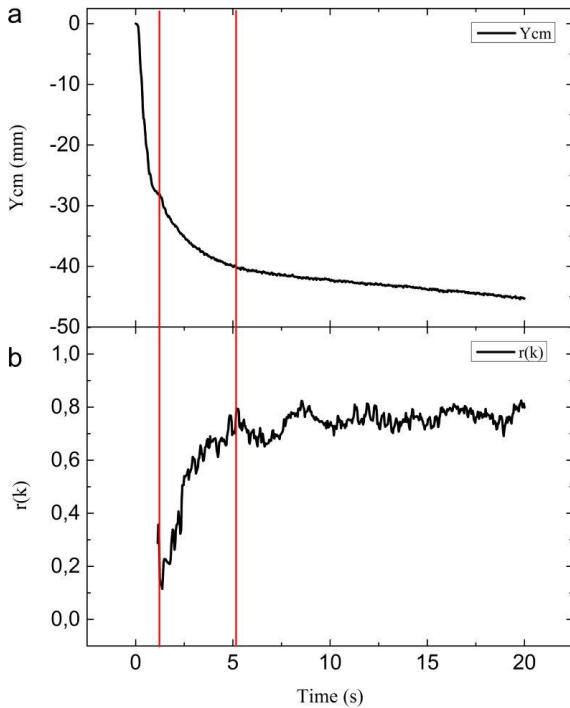


Figure 2. a) Penetration depth of the center of mass of the intruder (Y_{cm}) versus time obtained from the video processing. b) Correlation coefficient versus time (the small oscillations seen in the curve correspond to a small "wobbling" of the intruder as its bottom touches the jammed phase, but its upper part is in a partially fluidized region). With the help of the vertical guide lines it is easy to see that the changes in the correlation curve correspond to the changes in the sinking velocity of the intruder.

The key idea behind the *LIA* technique is that when the intruder is sinking, it will be a delay between $a_{x,R}$ and $a_{x,P}$ and the correlation coefficient will be smaller than one. As depth increases the correlation increases because the probe is finishing its passage through the fluidized granular phase, and reaches a jammed phase into the granular system. Finally the value of the correlation must reach a plateau close to 1 indicating the end of the sinking process, where the intruder is moving almost synchronously with the reference.

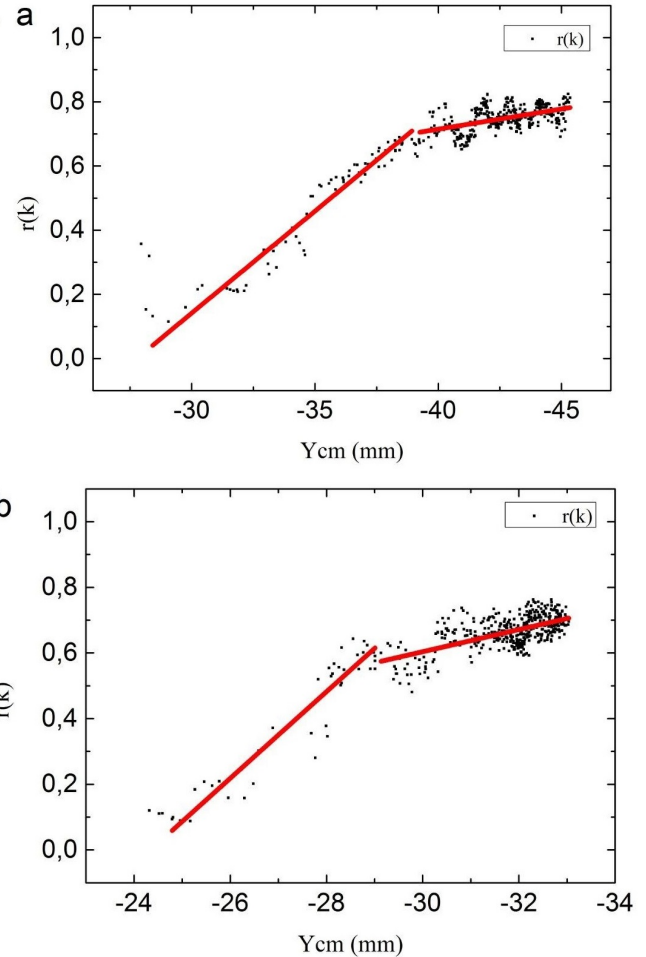


Figure 3. Correlation coefficient versus penetration depth of the center of mass (Y_{cm}) a) for 2.5 Hz and 800 cm^3/h b) for 2.5 Hz and 700 cm^3/h .

Figure 2 shows the representative curves of a) the penetration depth of the center of mass (Y_{cm}) and b) correlation coefficient versus time for an experiment with frequency of 2.5 Hz and air flux of 800 cm^3/h . Figure 2a shows the penetration depth of the center of mass in time obtained by the image processing from the videos taken by the digital camera. The general behavior of the sinking may be characterized, fundamentally, by three stages: initially there is a fast sinking process, that takes around 1 s, then a decrease in the sinking velocity and after 5 s a creep process takes place until the final stop. Figure 2b shows the time evolution of the correlation coefficient calculated using Eq. (1) with $D = 30$. The first region in the correlation curve could not be measured due to technical limitations of the accelerometers. At $t = 0$, as reported in [8] for the case of the 3D experiment, the correlation should be 1 because both

accelerometers are at rest relative to the Hele-Shaw cell. Then, we will have an initial fast-decrease in the correlation because in the initial moments, probe and reference have a delay in their horizontal accelerations as briefly discussed above. Later on, there is an increase of the correlation as a result of the arrival of the intruder to a region in the system in which it starts to move together with the granular mass. Finally the correlation remains at a saturation value until the end of the experiment.

Figure 3 shows the correlation coefficient as a function of the penetration depth of the center of mass (Y_{cm}) for experiments with a) frequency of 2.5 Hz and air flux of 800 cm³/h and b) frequency of 2.5 Hz and air flux of 700 cm³/h where it is visible the influence of the air flux in the granular system. With the help of the guide lines it is possible to identify two main regions in each experiment, one between 29 mm and 39 mm of depth and the other from 39 mm to 45 mm of depth in Figure 3a. In Figure 3b, there is one between 25 mm and 29 mm of depth and the other from 29 mm to 33 mm of depth. In the case of Figure 3a those regions match with the two regions after the first guide line in Figure 2. The previous curves may be useful as a calibration function to characterize the variation of the penetration depth of the center of mass of the intruder in the time from the temporal dependence of the correlation.

In the present contribution we have studied dry materials, but the technique can also be used for wet granular matter. Finally, substituting the intruder by a solid rock and the granular bed by actual soil may expand the technique to measure, in situ, the rheological response of a soil during an earthquake.

ACKNOWLEDGEMENTS

We acknowledge support from Project 29942WL (Fonds de Solidarité Prioritaire France-Cuba), from the EU ITN FlowTrans, and from the Alsatian network REALISE.

REFERENCES

- [1] J. Duran, *Sands, Powders and Grains: An Introduction to the Physics of Granular Materials* (Springer-Verlag New York, Inc., USA, 1999).
- [2] N.N. Ambraseys, *Earthquake Eng. Struct. Dyn.* Vol. **17**, 1 (1988).
- [3] National Research Council, *Liquefaction of soils during Earthquakes* (National Academy Press, Washington DC., USA, 1985).
- [4] C.Y. Wang y M. Manga, *Earthquakes and water* (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, German, 2014).
- [5] I. Sánchez, G. Gutiérrez, I. Zuriguel, and D. Maza, *Phys. Rev. E* Vol. **81**, 062301 (2010).
- [6] M. J. Niebling, E. G. Flekkoy, K. J. Maloy, and R. Toussaint, *Phys. Rev. E* Vol. **82**, 051302 (2010).
- [7] M. J. Niebling, E. G. Flekkoy, K. J. Maloy, and R. Toussaint, *Phys. Rev. E* Vol. **82**, 011301 (2010).
- [8] G. Sánchez-Colina, L. Alonso-Llanes, E. Martínez, A. J. Batista-Leyva, C. Clement, C. Flidner, R. Toussaint and E. Altshuler, *Rev. Sci. Inst.* **85**, 126101 (2014).
- [9] D.I. Goldman y P. Umbanhowar. *Phys. Rev. E* Vol. **77**, 021308 (2008)
- [10] A. Seguin *et al*, arXiv:0907.3453v2 [cond-matt.soft] (2009)
- [11] P. Umbanhowar y D. I. Goldman, *Phys. Rev. E* Vol. **82**, 010301 (2010).
- [12] F. Pacheco-Vázquez, G. A. Caballero-Robledo, J. M. Solano-Altamirano, E. Altshuler, A. J. Batista-Leyva, and J. C. Ruiz-Suárez, *Phys. Rev. Lett.* Vol. **106**, 218001 (2011).
- [13] E. Altshuler, H. Torres, A. González-Pita, G. Sánchez-Colina, C. Pérez-Penichet, S. Waitukaitis, and R. Cruz, *Geophys. Res. Lett.* Vol. **41**, 3032 (2014).
- [14] See www.freescale.com/zstar for details of MMA7456L ZSTAR3 accelerometer.

LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER EN EL CONTEXTO DE LA MECÁNICA DE FLUIDOS

THE SCHRÖDINGER EQUATION IN THE CONTEXT OF FLUID MECHANICS

D. CABRERA^a, P. FERNÁNDEZ DE CÓRDOBA^a, J.M. ISIDRO^a, J.M. VALDÉS PLACERES^b Y J. VAZQUEZ MOLINA^{a†}

a) Instituto Universitario de Matemática Pura y Aplicada, Universitat Politècnica de València, España; joavzmo@doctor.upv.es[†]

b) Departamento de Matemáticas, Universidad de Pinar del Río "Hermanos Saiz Montes de Oca", Cuba

† autor para la correspondencia

Recibido 16/9/2016; Aceptado 17/10/2016

Se deriva un mapeo entre la ecuación de Schrödinger y la de Navier-Stokes, que generaliza el que propuso Madelung en 1926 con la ecuación de Euler. Dado que la mecánica de fluidos es el paradigma de teoría emergente, estos mapeos apoyan la interpretación de la mecánica cuántica como una teoría efectiva, emergente a partir de otra más fundamental. En el nuevo mapeo, además, el potencial cuántico se identifica con el término viscoso, en línea con recientes estudios que afirman que la cuantidad tiene un origen disipativo.

We derive a mapping between the Schrödinger equation and the Navier-Stokes equation, which generalizes the one proposed by Madelung in 1926 with the Euler equation. Since fluid mechanics is the paradigm of an emergent theory, these maps support the interpretation of quantum mechanics as an effective theory, emerging from a more fundamental one. In the new mapping, moreover, the quantum potential is identified with the viscous term, in line with recent studies that claim that quantumness has a dissipative origin.

PACS: Foundations of quantum mechanics, 03.65.Ta. Navier-Stokes equations, 47.10.ad. partial differential equations, 02.30.Jr

I. INTRODUCCIÓN

La interpretación ontológica y epistemológica de la mecánica cuántica ha sido una cuestión a debate desde sus inicios. El mismo Einstein nunca aceptó que las leyes fundamentales de la naturaleza tuvieran un carácter indeterminista intrínseco [1].

La interpretación de Copenhague, que fue la dominante durante décadas, ha dado paso a multitud de interpretaciones hasta hoy. J. S. Bell divide las principales interpretaciones en románticas (en otras palabras, idealistas), y no románticas [2]. Románticas serían *la interpretación de los muchos mundos*, según la cual existe un universo para cada posible resultado de una medida; *la complementariedad de Bohr*, que establece una separación de escalas y pide que aceptemos la coexistencia de un mundo cuántico con uno clásico, regidos por diferentes reglas; y *el dualismo materia-mente*, defendido entre otros por Wigner y Wheeler, que afirma que la mente no se rige por las mismas reglas que el mundo material y ahí radica el colapso de la función de onda. Interpretaciones no románticas serían la introducción de *elementos no lineales o estocásticos* en la ecuación de Schrödinger; *la teoría de la onda-piloto* de Bohm y de Broglie, según la cual la mecánica cuántica emerge como teoría efectiva de una realidad determinista; y la propia *actitud pragmática* de Copenhague, que ve la mecánica cuántica como un método de cálculo de probabilidades y la despoja de toda ontología. "Esta filosofía pragmática es, pienso, consciente o inconscientemente la filosofía de trabajo de todos los que trabajan con la teoría cuántica de forma práctica...mientras trabajan. [Los físicos] nos diferenciamos sólo en el grado de

preocupación o complacencia con el que vemos...fuera de horas de trabajo...la ambigüedad intrínseca de la teoría" [2]¹.

Ya en 1926, tan sólo unos meses después de la publicación de la ecuación de Schrödinger, Erwin Madelung propuso una interpretación hidrodinámica de la misma, que podemos tomar como el primer antecedente de una interpretación emergentista. [3]. En su artículo, Madelung establece un mapeo entre la ecuación de Schrödinger, que describe la dinámica de una partícula cuántica, y la ecuación de Euler, que describe la dinámica de un fluido perfecto. Es habitual que la comunidad física vea estos mapeos como curiosidades matemáticas, sin ninguna consecuencia física. Sin embargo, existe un renovado interés en la propuesta de Madelung (e.g. [4], [5]) en un contexto en el que la posibilidad de la mecánica cuántica como teoría emergente cobra fuerza (e.g. [6], [7], [8]).

Pero ¿por qué limitarse a un fluido perfecto? Los fluidos reales son viscosos y la ecuación que describe su comportamiento es la de Navier-Stokes. La diferencia entre las ecuaciones de Euler y Navier-Stokes, aunque formalmente consiste únicamente en el término viscoso, va mucho más allá en cuanto a propiedades matemáticas y significado físico. Por ejemplo, la cuestión de la existencia y unicidad de soluciones de un problema de valores iniciales de la ecuación de Navier-Stokes es uno de los problemas abiertos más importantes de la matemática actual, cuya solución está recompensada con un millón de dólares [9]. En cambio, se conocen contraejemplos a la unicidad y existencia en el caso de la ecuación de Euler [10], lo que no es más que una evidencia del carácter ideal de esta ecuación. La viscosidad nula no existe, aunque en muchas aplicaciones sirva como

¹Todas las citas que se incluyen en este artículo cuyo original no está en español son traducciones propias.

aproximación. Así, es interesante estudiar la existencia e interpretación de un potencial mapeo entre la ecuación de Schrödinger y la de Navier-Stokes, en lugar de la de Euler.

II. MECÁNICA DE FLUIDOS vs CUÁNTICA

El objetivo de esta sección es establecer sendos mapeos entre la ecuación de Schrödinger y las ecuaciones de Euler y Navier-Stokes, respectivamente. Primero, recordamos los fundamentos físicos necesarios para una correcta interpretación de las ecuaciones involucradas.

II.1. Fluidos, Euler y Navier-Stokes

La mecánica de fluidos es una rama de la mecánica del medio continuo. “Esto significa que cualquier pequeño elemento de volumen en el fluido se asume siempre lo bastante grande como para contener un gran número de moléculas” [8]. Se asume que todas las funciones que se emplean están bien definidas y son lo suficientemente suaves a trozos como para permitir las operaciones estándar del cálculo infinitesimal. Estas funciones macroscópicas, por lo general medibles, se asume que son el promediado de variables mecánicas válidas a una escala más fundamental (las posiciones y velocidades de las *moléculas* que menciona Landau), lo que hace que la mecánica del medio continuo sea el paradigma de teoría emergente.

¿Cuál es el espacio de estados de un fluido? “La descripción matemática del estado de un fluido en movimiento se efectúa mediante funciones que dan la distribución de la velocidad del fluido y dos cantidades termodinámicas, por ejemplo la presión y la densidad [...] Por tanto mediante cinco cantidades [...] el estado del fluido en movimiento está completamente determinado [...] En consecuencia, un sistema de ecuaciones de dinámica de fluidos debería contener cinco ecuaciones para ser completo” [11].

Es decir, el estado de un fluido viene descrito por un campo vectorial: $\mathbf{v}, p, \rho : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}_+$, que a cada punto del espacio-tiempo (x, t) le asigna una velocidad, presión y densidad.

Las cinco ecuaciones que describen la dinámica del campo son:

- La ecuación de continuidad.
- Una ecuación termodinámica, como la del flujo de calor.
- Una ecuación (vectorial) que describa la dinámica del campo de velocidades

Para fluidos viscosos, en los que existe transferencia tangencial de momento, ésta última ecuación es la ecuación de Navier-Stokes. En la notación de [11], ésta es:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} + \frac{1}{\rho} \nabla p - \frac{\eta}{\rho} \nabla^2 \mathbf{v} - \frac{1}{\rho} \left(\zeta + \frac{\eta}{3} \right) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{v}) = 0, \quad (1)$$

donde $\eta, \zeta > 0$ son los denominados coeficientes de viscosidad (¿por qué hay *dos* coeficientes de viscosidad si el tensor de tensiones, a priori, tiene nueve componentes? Véase e.g. [12] para una derivación matemáticamente rigurosa y [13] para una derivación más amigable). Si recordamos la identidad del cálculo vectorial: $\nabla^2 \mathbf{v} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{v}) - \nabla \times (\nabla \times \mathbf{v})$, la ecuación de Navier-Stokes para un flujo irrotacional se simplifica a:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} + \frac{1}{\rho} \nabla p - \frac{\eta'}{\rho} \nabla^2 \mathbf{v} = 0, \quad (2)$$

donde se ha definido:

$$\eta' := \frac{4}{3} \eta + \zeta. \quad (3)$$

Para el caso de fluidos perfectos, no existen fuerzas microscópicas entre partículas y toda la transferencia de momento se debe a la presión. Esto se traduce en que la viscosidad es nula, y la dinámica del fluido viene descrita por la ecuación de Euler:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} + \frac{1}{\rho} \nabla p = 0. \quad (4)$$

II.2. La ecuación de Schrödinger

En mecánica cuántica, la dinámica de la función de onda $\psi(x, t)$ de una partícula de masa m sujeta a un potencial $V(x)$ viene descrita por la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi - V\psi = 0. \quad (5)$$

II.3. Ansatz

La función de onda se puede separar en amplitud y fase como:

$$\psi = \psi_0 \exp\left(S + \frac{i}{\hbar} I\right) = \psi_0 A \exp\left(\frac{i}{\hbar} I\right), \quad (6)$$

donde I tiene unidades de acción mecánica, al igual que \hbar ; S es adimensional; y hemos definido $A := \exp(S)$ por simplicidad en lo sucesivo.

Sustituyendo ψ en la ecuación de Schrödinger, se obtiene una ecuación cuya parte imaginaria es:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{m} \nabla S \cdot \nabla I + \frac{1}{2m} \nabla^2 I = 0, \quad (7)$$

y cuya parte real es:

$$\frac{\partial I}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\nabla I)^2 + V + U = 0, \quad (8)$$

donde aparece un nuevo término potencial U , puramente cuántico, que hemos definido como:

$$U := \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\nabla A^2}{A} = \frac{-\hbar^2}{2m} [(\nabla S)^2 + \nabla^2 S]. \quad (9)$$

Si definimos $\nabla I = m\mathbf{v}$, el gradiente de la parte real (ec. 8), dividido por m , queda:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v} + \frac{1}{m}\nabla U + \frac{1}{m}\nabla V = 0, \quad (10)$$

donde se ha empleado la identidad vectorial $\nabla(\mathbf{v}^2) = 2(\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v} + 2\mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{v})$ y el hecho de que el rotacional de un gradiente es nulo.

II.4. Sendos mapeos

Las siguientes identificaciones permiten, por tanto, mapear la ecuación de Schrödinger con la de Navier-Stokes, como algunos de los autores ya observamos en [14]:

Tabla 1. Mapeo de términos entre la ecuación de Navier-Stokes y la de Schrödinger

Navier-Stokes	Schrödinger
$m\mathbf{v}$	∇I
$\nabla p/\rho$ y eventuales Fuerzas externas	$\nabla V/m$
$-\frac{\eta}{\rho}\nabla^2\mathbf{v}$	$\nabla U/m$

Por otro lado, el mapeo que Madelung observó en [3], en nuestra notación, establece que:

Tabla 2. Mapeo de términos entre la ecuación de Euler y la de Schrödinger.

Euler	Schrödinger
$m\mathbf{v}$	∇I
Fuerzas externas	$\nabla V/m$
$\nabla p/\rho$	$\nabla U/m$

III. DISCUSIÓN

Ambos mapeos difieren fundamentalmente en la interpretación del potencial cuántico U . En el mapeo de Madelung éste se identifica con la presión, que, en mecánica del medio continuo y para fluidos perfectos, es una variable que emerge de la velocidad de las moléculas (véase e.g. [15]). Es decir, U tiene una interpretación puramente cinética y conservativa.

En nuestro mapeo, en cambio, U se identifica con el término viscoso, que siempre es disipativo. La disipación, como mecanismo de pérdida de información, se puede entender por tanto como el origen de los efectos cuánticos en un sistema. Este hecho cobra especial relevancia si se tiene en cuenta que “hay un número creciente de modelos deterministas de objetos cuánticos que se basan en conjeturar mecanismos disipativos o pérdida de información fundamental” [16]. Nótese que no se habla aquí de una transición *de cuántico a clásico*, sino *de clásico a cuántico* gracias a mecanismos de pérdida de información. 't Hooft ya afirmó que “para todo sistema cuántico existe al menos un modelo determinista que reproduce toda su dinámica tras precuantización”, y sus modelos son válidos, al menos, para sistemas finito-dimensionales [17]. Además, recientemente

se ha observado experimentalmente esta transición en un sistema fotónico abierto con fuertes interacciones [18].

En cualquier caso, en palabras de Madelung, “vemos por tanto que [la ecuación de Schrödinger] es completamente explicable en términos hidrodinámicos, y que solo aparece una peculiaridad en un término, el que representa el mecanismo interno del continuo”, esto es, en U [3].

IV. CONCLUSIONES

El estudio de mapeos entre las ecuaciones fundamentales de diferentes teorías es de interés para la matemática aplicada puesto que los resultados de una teoría se pueden trasladar, a través del mapeo, a la otra teoría. En este caso, más allá del interés matemático, hay un interés físico puesto que la existencia de este mapeo apoya la idea de la mecánica cuántica como teoría emergente. Es decir, como descripción fenomenológica de una teoría subyacente más fundamental.

La mecánica de fluidos es el paradigma de teoría emergente, que maneja variables en una escala macroscópica como la densidad, la temperatura, etc. promediadas a partir de variables de una escala microscópica subyacente sobre la que no es necesario tener información detallada. Para la mecánica del medio continuo, esa teoría subyacente debería ser la mecánica clásica, es decir, el espacio de fases finito-dimensional de las posiciones y las velocidades de las partículas que se considere fundamentales (a las que hemos venido llamando *moléculas*). El paso del espacio de fases *micro* al *macro*, esto es, de un conjunto finito de partículas a un medio continuo, es uno de los problemas fundamentales de la mecánica estadística (véase [15] para una discusión detallada de diferentes técnicas de promediado).

Si la mecánica cuántica se puede entender como una mecánica de fluidos, parece evidente que sus variables (función de onda, potencial, etc.) también son el resultado del promediado de *algo* más fundamental. Construir ese espacio de fases *micro* sobre el que hacer un promediado que tenga como resultado las ecuaciones de la mecánica cuántica es uno de los retos fundamentales de las líneas de investigación enmarcadas bajo el nombre de *mecánica cuántica emergente*.

El hecho de que *la peculiaridad cuántica* que menciona Madelung aparezca precisamente en *el mecanismo interno del continuo* conecta las cuestiones interpretativas fundamentales de la mecánica cuántica y la mecánica del medio continuo.

Nuestro grupo de investigación espera, además, aprovechar los citados mapeos para resolver problemas de cosmología newtoniana (que no es más que mecánica de fluidos a escalas cosmológicas) mediante técnicas de mecánica cuántica.

V. AGRADECIMIENTOS

J. Vazquez agradece a Manuel Monleón Pradas las referencias y discusiones sobre mecánica del medio continuo, y agradece la financiación al Programa de Becas de Movilidad Académica de la AUIP y al Programa de Ayudas de Investigación y Desarrollo de la UPV. D. Cabrera agradece

la financiación del proyecto con Ref. FIS2014-51948-C2-1-P del Ministerio de Economía y Competitividad (España).

VI. CONTRIBUCIONES

Todos los autores contribuyeron por igual en la redacción del artículo.

REFERENCIAS

- [1] A. Einstein, B. Podolsky and N. Rosen, *Physical Review* 47, 777 (1935).
- [2] J. S. Bell, *Proceedings of Nobel Symposium* 65, 359 (1989).
- [3] E. Madelung, *Zeitschrift fur Physik* 40, 322 (1927).
- [4] M. Reddiger, The madelung picture as a foundation of geometric quantum theory, arxiv:1509.00467v3 [quant-ph] (2016).
- [5] D. Fusca, The madelung transform as a momentum map, arxiv:1512.04611v2 [math.sg] (2016).
- [6] I. Licata, ed., *Beyond peaceful coexistence. The emergence of space, time and quantum* (Imperial College Press, 2016).
- [7] S. L. Adler, *Quantum theory as an emergent phenomenon* (Cambridge University Press, 2004).
- [8] G. 'tHooft, The Cellular Automaton Interpretation of Quantum Mechanics, arXiv:1405.1548v3 [quant-ph] (2015).
- [9] C. L. Fefferman, Existence and smoothness of the navier stokes equations, Technical report, Clay Mathematics Institute, available at <http://www.claymath.org/>(accessed 2016).
- [10] J. Glimm, D. H. Sharp, H. Lim, K. Ryan and W. Hu, *Philosophical Transactions of the Royal Society A* 373 (2015).
- [11] L. Landau and E. M. Lifshitz, *Fluid Mechanics* 2nd edition (Pergamon Press, 1987).
- [12] L. A. Segel, *Mathematics applied to continuum mechanics* (Society for Industrial and Applied Mathematics, 1977).
- [13] A. J. Chorin and J. E. Marsden, *A mathematical introduction to uid mechanics* (3ed) (Springer, 1992).
- [14] P. Fernández de Córdoba, J. M. Isidro and J. Vazquez Molina, *Entropy* 18 (2016).
- [15] E. B. Tadmor and R. E. Miller, *Modeling materials. Continuum, atomistic and multiscale techniques*, chapter Atomistic foundations of continuum concepts (Cambridge University Press, 2011).
- [16] H. T. Elze, *Journal of Physics: Conference Series* 171 (2009).
- [17] G. 't Hooft, *AIP Conference Proceedings* 957, 154 (2007).
- [18] J. Raftery, D. Sadri, S. Schmidt, H. E. Türeci and A. A. Houck, *Physical Review X* 4 (2014).

ESTUDIO DE LA REACCIÓN $Si(^3P) + OH(X^2\Pi) \rightarrow SiO(X^1\Sigma^+) + H(^2S)$ MEDIANTE EL MÉTODO DEL POTENCIAL PROMEDIO DEL ESPACIO DE FASE (MPPST)

MEAN POTENTIAL PHASE SPACE THEORY STUDY OF THE $Si(^3P) + OH(X^2\Pi) \rightarrow SiO(X^1\Sigma^+) + H(^2S)$ REACTION

R. L. PANADÉS-BARRUETA^a, J. RUBAYO-SONEIRA^a, M. MONNERVILLE^b, P. LARREGARAY^c, F. DAYOU^d Y A. RIVERO-SANTAMARÍA^{ab†}

a) Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas, Habana AP 6163, Cuba; arivero3122@gmail.com[†]

b) Laboratoire de Physique des Lasers, Atomes et Molécules, UMR 8523 du CNRS, Centre d'Études et de Recherches Lasers et Applications, Université Lille I, Bât. P5, 59655 Villeneuve d'Ascq Cedex, France

c) Institut des Sciences Moléculaires, Université Bordeaux 1, 351 Cours de la Libération, 33405 Talence Cedex, France

d) Laboratoire d'Étude du Rayonnement et de la Matière en Astrophysique, UMR 8112 du CNRS, Observatoire de Paris-Meudon, Université Pierre et Marie Curie, 92195 Meudon Cedex, France

† autor para la correspondencia

Recibido 22/7/2016; Aceptado 31/10/2016

La molécula de SiO tiene un papel fundamental en el desarrollo de las investigaciones sobre la química del medio interestelar (MI). Los modelos actuales [1–3] establecen la reacción $Si(^3P) + OH(X^2\Pi) \rightarrow SiO(X^1\Sigma^+) + H(^2S)$ como una de sus fuentes principales en las zonas de gran actividad del MI, sin embargo no existen datos experimentales para la misma y su estudio teórico puede resultar complicado debido a las características de la superficie de energía potencial del sistema. En el presente trabajo se obtienen los observables: sección eficaz integral (SEI), constante de velocidad térmica ($k(T)$) y distribuciones ro-vibracionales mediante el Método del Potencial Promedio del Espacio de Fase (MPPST) [4] en sus dos variantes. La SEI (y consecuentemente los otros observables) dependen de la forma en que se ajusta el potencial en ambos canales. Por esta razón, dicho proceso de ajuste fue mejorado utilizando una metodología novedosa (a2-MPPST) propuesta por nuestro grupo de trabajo. Los resultados obtenidos de esta forma muestran mayor concordancia con los reportados en la literatura (QCT [5, 6]). La utilización de métodos estadísticos como el MPPST, ampliados con esta propuesta, puede resultar una valiosa primera aproximación a la dinámica de las colisiones triatómicas.

The SiO molecule is the most widespread silicon-bearing molecule in the interstellar medium. Its largest abundances are found in regions of star formation, whereas its abundance is very low in quiescent cold dark clouds. The major source of SiO in the “shock” regions of the interstellar medium is the reaction $Si(^3P) + OH(X^2\Pi) \rightarrow SiO(X^1\Sigma^+) + H(^2S)$, however there is not experimental data available for it. Here we show and compare with quasi-classical trajectory method (QCT), the results of Mean Potential Phase Space Theory (MPPST) calculations of integral cross section (ICS), thermal rate constant ($k(T)$) and ro-vibrational distributions, using the numerical approach (n-MPPST) and the analytical ones: the traditional framework (a1-MPPST) and a new feature suggested by our group (a2-MPPST). The ICS (and consequently the other observables) values depend strongly on the fitted potential in both reaction channels, so in order to develop more precise calculations we divided the fit process in two main regions depending on the collision energy. The obtained ICS values shows that the a2-MPPST has a greater agreement than a1-MPST and n-MPPST with QCT. We expect that subsequent refinements of MPPST like the showed on this work could lead to an alternative to more sophisticated and expensive calculations, and also be a valuable first approach to the triatomic collisions dynamics.

PACS: Molecular dynamics calculations in atomic and molecular physics, 31.15.xv, Molecular interactions in astrophysics, 95.30.Ft, Chemical kinetics, 82.20.-w

I. INTRODUCCIÓN

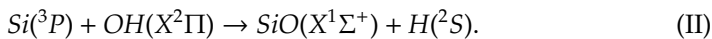
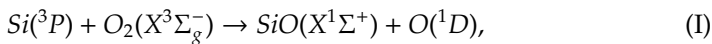
La química del silicio en el medio interestelar (MI) fue descrita por vez primera a finales del siglo pasado, en los trabajos de Solomon y Klemperer [7], Turner y Delgarno [8], y Millar [9]. A partir de estos descubrimientos, fueron propuestos diversos modelos [1–3] para explicar y describir el comportamiento de sus principales compuestos en estas regiones [10]. Entre ellos, el más ampliamente distribuido es el monóxido de silicio SiO , el cual fue descubierto en 1971 mediante la observación de las líneas rotacionales presentes en su estado vibracional base [11]. La acumulación de esta molécula en el MI es el resultado de la erosión de los granos de polvo interestelares compuestos de silicatos

por la acción de las ondas de choque [12, 13]. Resulta notable que su abundancia varía hasta en seis ordenes de magnitud dependiendo de las condiciones físicas del medio [2, 14], razón por la cual puede considerarse un trazador natural de la actividad presente en determinadas regiones interestelares, como lo evidencia su utilización en investigaciones muy recientes [15, 16].

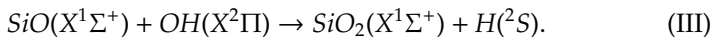
En numerosas observaciones realizadas en regiones frías y calientes del MI solo se ha detectado SiO en zonas donde la temperatura cinética sobrepasa los 30 K. Los modelos astrofísicos establecidos proponen que la abundancia del SiO depende de la temperatura según la ley $e^{-\frac{E_{10}}{T}}$, donde $E_{10} = 111$ K es la diferencia energética entre los dos primeros niveles

de estructura fina del estado base del silicio [1].

El modelo aceptado actualmente considera que el SiO se produce mediante la erosión del silicio presente en los granos de polvo interestelares por la acción de las ondas de choque y su posterior reacción con las moléculas presentes en el MI. Para explicar su formación se han propuesto dos reacciones fundamentales, ambas exotérmicas [13, 17]



La concentración de SiO puede verse limitada por la reacción colateral [13]



La constante de velocidad experimental solo ha sido determinada para la reacción (I) y los estudios cinéticos de la misma muestran que constituye una fuente rápida de SiO en el intervalo de temperaturas del MI [17, 18]. Sin embargo, observaciones recientes muestran abundancias muy bajas de O_2 molecular en las zonas de gran actividad del MI [19], fenómeno conocido como “problema de dióxígeno interestelar” y que probablemente es causado por la gran reactividad de esta molécula. En contraste, el radical hidroxilo ha sido observado con mayores concentraciones en las mencionadas regiones “calientes” o de actividad elevada [20], por lo que se supone que la reacción (II) sea la principal fuente de monóxido de silicio en estas zonas.

Las publicaciones científicas existentes describen la colisión (I) a partir de resultados experimentales y teóricos [17, 21, 22], mostrando que es un sistema altamente reactivo y exotérmico (-0.93 eV), cuyo comportamiento estadístico es dependiente de la energía de colisión. La sección eficaz integral obtenida muestra un decrecimiento monótono con el aumento de la energía de colisión, lo cual representa el comportamiento típico de las denominadas reacciones sin barrera. La probabilidad de reacción reportada es prácticamente constante en el intervalo de energías estudiadas ($0.05 - 0.6$ eV), lo cual indica una contribución a la reactividad de casi la totalidad de configuraciones moleculares hasta un valor máximo del momento angular total (J_{max}). Los valores de constante de velocidad térmica teóricos fueron corroborados por los experimentales, presentando un máximo entre $3 \times 10^{-10} - 4 \times 10^{-10} \text{ cm}^3\text{s}^{-1}$ [18].

La colisión (II) ha sido descrita [5, 6] solo por trabajos teóricos, existiendo únicamente un resultado experimental indirecto de constante de velocidad térmica, reportado para el intervalo de temperaturas de $2470 - 3125$ K en un artículo dedicado al estudio de la colisión $Si + N_2O$ [23]. El sistema es exotérmico (-3.6 eV) y posee 12 estados electrónicos posibles. La sección eficaz integral determinada computacionalmente muestra una débil dependencia con la excitación rotacional inicial del diátomo, evidenciando un comportamiento típico de reacción sin barrera. La constante de velocidad térmica teórica fue reportada en el intervalo de $10 - 1000$ K, cuando el acoplamiento espín-órbita de los reaccionantes se toma en consideración, la constante de velocidad total presenta un máximo de $4.34 \times 10^{-10} \text{ cm}^3\text{s}^{-1}$ a 20 K [6].

La escasez de datos cinéticos experimentales enfocados en la reacción (II) está estrechamente relacionada con la dificultad de colisionar radicales a bajas temperaturas en los laboratorios terrestres [24]. En adición, los estudios teóricos sobre la dinámica de este proceso resultan complicados debido a las características de la superficie de energía potencial (SEP) del sistema [25]. En los últimos años han sido publicados diversos trabajos teóricos sobre colisiones entre átomos de capa abierta (C, N, O, S) y el radical hidroxilo [26–30], los cuales permiten esclarecer los mecanismos mediante los cuales proceden este tipo de reacciones. Estos hechos representan un gran incentivo al desarrollo de investigaciones como la presente, que constituyen una valiosa primera aproximación a la dinámica de sistemas poco estudiados como el (II), contribuyendo además a generalizar el estudio de las colisiones triatómicas.

El primer trabajo teórico sobre el sistema (II) fue realizado por Rivero *et al.* [5, 6] en el año 2014. En el mismo se desarrolla un análisis exhaustivo de la dinámica de la colisión $Si + OH$ utilizando diversas metodologías, entre ellas el Método de las Trayectorias Cuasi-Clásicas (QCT por sus siglas en inglés), métodos cuánticos dependientes del tiempo (TDWP por sus siglas en inglés) y el **Método del Potencial Promedio del Espacio de Fase** (MPPST por sus siglas en inglés) [4]. Este último método ha mostrado grandes beneficios computacionales y una descripción cualitativa adecuada del sistema, sin embargo, su aplicación se ha visto limitada solo a la variante analítica tradicional del mismo (a1-MPPST). Los argumentos anteriores constituyen la principal motivación del presente trabajo, en el cual se extiende el estudio del sistema de interés con el citado método utilizando una variante numérica (n-MPPST) y una novedosa variante analítica propuesta por nuestro grupo de trabajo (a2-MPPST). Como bases fundamentales de estas investigaciones se halla el cálculo *ab-initio* sobre el sistema de tres átomos $Si-O-H$ realizado por Dayou [25] y un profundo estudio del comportamiento electrónico de dicho sistema en la región asintótica del potencial [31], los cuales permitieron el desarrollo de la SEP utilizada en la determinación de los observables deseados con cada uno de los métodos.

II. MPPST

La dinámica de interacción de sistemas gaseosos fue estudiada en sus inicios mediante la **Teoría del Estado de Transición** (TST) [32]; teoría esencialmente clásica cuya asunción principal es que el “paso” a través del estado de transición (de reaccionantes a productos o viceversa) es un “momento de decisión” para la reacción, pues en este punto se hace imposible el retorno al estado inicial. El estado de transición en la teoría clásica puede visualizarse como una “superficie divisora” que separa las regiones de reaccionantes y productos en el espacio de configuración (más general, del espacio de fase). Con la obtención cada vez mayor de datos experimentales [24], surgieron evidencias que indican insuficiencias en la TST para describir la cinética de sistemas gaseosos. Su utilización actual está limitada a definir un estado de transición que presente un acuerdo

razonable con el resultado experimental.

Para sistemas del tipo $A + BC \rightarrow AB + C$ que proceden sin barrera energética se desarrolló una alternativa [33, 34] que posibilita una mayor concordancia entre teoría y experimento: la **Teoría del Espacio de Fase (PST)**. En la PST la sección eficaz integral de formación del complejo activado es estimada mediante el modelo clásico de captura de Langevin [35]. La probabilidad de formación de los productos a partir del complejo intermediario es proporcional a la fracción de espacio de fase disponible a estos, dividida por el espacio de fase total, en consistencia con las leyes de conservación de la energía y el momento angular total. Se asume además una distribución microcanónica de los estados del espacio de fase del complejo. Los movimientos vibratorios internos y las penetraciones por efecto túnel a la barrera potencial pueden ser cuantizadas artificialmente, en aras de obtener observables más precisos.

Por otra parte, un factor muy influyente en el desarrollo de los estudios dinámicos (y de modelación computacional en general) es la gestión de los recursos de cómputo. La utilización de métodos estadísticos alternativos a las costosas aproximaciones cuasi-clásicas y cuánticas, ha sido potenciada en aras de lograr una adecuada eficiencia computacional sin sacrificar la calidad de los resultados obtenidos, o sea, logrando una correcta integración de las características topológicas de cada SEP. Es por esta razón que fue implementada una variante de la PST conocida como MPPST [4], la cual se fundamenta en la utilización de potenciales promediados con respecto a los ángulos de Jacobi. Sus generalidades serán discutidas a continuación.

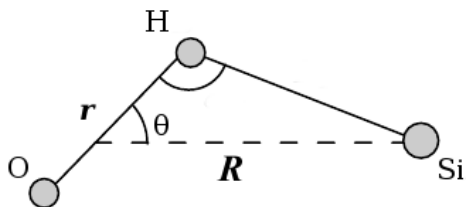


Figura 1. Sistema de coordenadas de Jacobi para el estudio de la colisión $Si + OH$.

En el canal de entrada (reaccionantes) la energía potencial total está dada por

$$U(R, r, \theta) = u(r) + V(R, r_e, \theta), \quad (1)$$

donde R , r y θ son las coordenadas de Jacobi (ver Figura 1), $u(r)$ es el potencial del diátomo inicial aislado con la distancia de equilibrio r_e y $V(R, r_e, \theta)$ es el potencial de interacción entre el átomo y el diátomo iniciales. En la reacción $Si + OH \rightarrow SiO + H$, la forma de la SEP evidencia una débil dependencia angular, esto significa que, debido a la orientación aleatoria del diátomo con respecto al átomo, la dinámica del canal de entrada pueda ser descrita por

$$U(R, r, \theta) \approx u(r) + \bar{V}(R), \quad (2)$$

¹También conocida como región asintótica. Según Larregaray *et col.* [4], para los valores de energía de colisión usuales en los experimentos de flujos cruzados, la captura tiene lugar para distancias entre los reaccionantes mayores que $2 - 3 \text{ \AA}$.

donde

$$\bar{V}(R) = \frac{1}{2} \int_0^\pi V(R, r_e, \theta) \sin \theta d\theta, \quad (3)$$

es el promedio angular del potencial $V(R, r_e, \theta)$. Estos razonamientos pueden ser extendidos también (si la forma de la SEP lo permite) al canal de salida (productos). En este punto, la modelación de la reacción utilizando el MPPST puede abordarse mediante dos variantes fundamentales:

- Numérica (n-MPPST), donde se realiza un ajuste por *spline cúbico* de los valores de $\bar{V}(R)$
- Analítica (a-MPPST), donde se realiza un ajuste de la forma $\bar{V}(R) \approx -\frac{C_6}{R^6}$

La variante numérica del método no ha sido empleada aún en trabajos publicados. La variante analítica tradicional (por convenio denominada a1-MPPST en el presente trabajo), en la cual se realiza el ajuste del potencial promediado $\bar{V}(R)$ en toda la *región de largo alcance*¹ y se procede luego según el método MPPST, ha sido empleada para el estudio de las reacciones de colisión [5, 36] mostrando mejores acuerdos con los métodos cuánticos que el método PST. A partir de estos hechos y conociendo que el valor de los observables deseados depende de la calidad del ajuste del potencial promedio, uno de los principales objetivos de nuestro trabajo fue establecer una metodología que garantizara el mejor ajuste posible, dependiendo de las condiciones en que transcurre la reacción. En consecuencia, una nueva variante del método (denominada a2-MPPST) que satisface los requerimientos anteriormente mencionados fue desarrollada en esta investigación.

II.1. La aproximación a2-MPPST

En las colisiones moleculares, si se considera que en el momento inicial los reaccionantes se encuentran muy distantes, la energía total E_t puede expresarse como [37]

$$E_t = E_c = K_c + U_{ef}(R, r), \quad (4)$$

donde K_c es la energía cinética y $U_{ef}(R, r)$ el potencial efectivo en el canal de entrada

$$U_{ef}(R, r) = u(r) + \bar{V}(R) + \frac{E_c b^2}{R^2}, \quad (5)$$

El tercer sumando del miembro derecho representa la energía centrífuga. La misma es función del parámetro de impacto b y de la energía de colisión E_c , originándose por la rotación mutua de las especies que colisionan a medida que la distancia R entre ellas disminuye. Esta energía actúa como una barrera en el proceso de acercamiento del átomo al diátomo, la cual compite con el potencial atractivo $\bar{V}(R)$.

Según el modelo de captura de Langevin [35], el máximo del potencial efectivo ocurre a un R_{max} tal que todas las moléculas que lo sobrepasan pueden entrar en la región de las fuerzas químicas, o en otras palabras, reaccionar.

Aplicando la condición de máximo de una función a la expresión (5), tomando el potencial promediado como

$$\bar{V}(R) = -\frac{C_6}{R^6}, \quad (6)$$

se tiene que

$$\frac{\partial U_{ef}(R, r)}{\partial R} = \frac{du(r)}{dR} - C_6 \frac{d(R^{-6})}{dR} + E_c b^2 \frac{d(R^{-2})}{dR}. \quad (7)$$

Luego de determinar las derivadas, conociendo que debido a la independencia de R y r la primera de ellas es nula, tenemos que

$$\frac{\partial U_{ef}(R, r)}{\partial R} = \frac{6C_6}{R^7} - \frac{2E_c b^2}{R^3}. \quad (8)$$

De acuerdo con la condición necesaria para la existencia de extremos en las funciones (máximo en nuestro caso), obtenemos la expresión

$$\left. \frac{\partial U_{ef}(R, r)}{\partial R} \right|_{R=R_{max}} = \frac{6C_6}{R_{max}^7} - \frac{2E_c b^2}{R_{max}^3} = 0, \quad (9)$$

resolviendo la ecuación anterior podemos determinar R_{max}

$$R_{max}^4 = \frac{3C_6}{E_c b^2}. \quad (10)$$

La reacción química se verifica si las moléculas pueden alcanzar la distancia mutua $R = R_{max}$ con al menos cierta energía cinética remanente [37], esto es

$$K_c = E_c - U_{ef}(R, r) = E_c - u(r) - \bar{V}(R) - \frac{E_c b^2}{R^2} \geq 0. \quad (11)$$

Reajustando la expresión anterior y sustituyendo el potencial según (6), se tiene

$$K_c + u(r) = E_c + \frac{C_6}{R^6} - \frac{E_c b^2}{R^2} \geq 0, \quad (12)$$

puede notarse que el miembro derecho siempre decrece con el aumento de b , luego, debe existir un b_{max} límite con el que se obtiene la igualdad en (12) una vez alcanzado R_{max}

$$K_c + u(r) = E_c + \frac{C_6}{R_{max}^6} - \frac{E_c b_{max}^2}{R_{max}^2} = 0. \quad (13)$$

Resolviendo la ecuación anterior puede obtenerse el valor de b_{max}

$$b_{max}^2 = R_{max}^2 + \frac{C_6}{E_c R_{max}^4}, \quad (14)$$

²El término *estado a estado* hace referencia a la evolución del sistema desde un "estado cuántico" específico de los reaccionantes (traslación, rotación, vibración y estado electrónico) a un "estado cuántico" específico de los productos.

Combinando la anterior ecuación con (10) evaluada en $b = b_{max}$ encontramos la dependencia de R_{max} con C_6 y la energía de colisión

$$R_{max} = \left(\frac{2C_6}{E_c} \right)^{\frac{1}{6}}. \quad (15)$$

Sustituyendo esta expresión en (6) se obtiene el valor del potencial atractivo en R_{max} cuando $b = b_{max}$

$$\bar{V}(R_{max}) = -\frac{E_c}{2}. \quad (16)$$

Esta importante condición establece que el valor del potencial atractivo en la región donde ocurre la captura es la mitad de la energía de colisión. En el marco del MPPST es de vital importancia que el ajuste del potencial promediado angularmente en esta región sea muy preciso, pues el valor de C_6 obtenido determinará el valor del momento angular total J_{max} según (21) y este a su vez, el valor de las secciones eficaces diferenciales e integrales y la constante de velocidad térmica. Por esta razón en a2-MPPST el ajuste del potencial se divide en regiones que dependen de E_c . Luego de esta modificación es esperada una mejora en la calidad de los resultados obtenidos con respecto a a1-MPPST, además de tiempos de ejecución mucho menores que los de n-MPPST. A continuación será descrita la forma de obtención de los observables de interés para el sistema $Si + OH(v = 0, j = 0) \rightarrow SiO + H$ según a2-MPPST.

II.2. Sección eficaz integral

La Sección Eficaz Diferencial (SED) *estado a estado*² es la base para la determinación de los demás observables y en el canal de salida puede calcularse como [34]

$$\frac{d\sigma(v', j', \phi', E_c)}{d\omega} = \frac{1}{2\mu E_c \sin \phi'} \times \int_0^{J_{max}} P_{cap}(E_c, J) P_P(v', j', \phi', E', J) J dJ, \quad (17)$$

donde E_c es la energía de colisión, v' es el número cuántico vibracional del diátomo producto y j' su momento angular rotacional, J es el momento angular total, μ es la masa reducida de A-BC, ϕ' es el ángulo de dispersión con respecto al centro de masas del sistema, $d\omega = 2\pi \sin \phi' d\phi'$ es el diferencial de ángulo sólido definido por el cono de eventos reactivos y E' es el exceso de energía total con respecto a los productos

$$E' = E_c + \Delta E_0 + E_{v=0}, \quad (18)$$

aquí ΔE_0 es la exoergicidad de la reacción (excluyendo las energías de punto cero de reaccionantes y productos) y $E_{v=0}$ se determina según la expansión de Dunham de segundo orden [38]

$$E_v = hc\omega_e(v + \frac{1}{2}) - hc\omega_e x_e(v + \frac{1}{2})^2, \quad (19)$$

donde ω_e y x_e son coeficientes dependientes del diátomo en particular y v su número cuántico vibracional.

La probabilidad de captura $P_{cap}(E_c, J)$ (o probabilidad de formación del complejo intermediario) es evaluada utilizando el modelo de captura de Langevin [35]. Debido a que el diátomo inicial se encuentra en su estado rotacional base ($j = 0$), se tiene que $J = L$ (Recordar que se verifica la relación $J = L + j$), donde L es el momento angular orbital. En el marco de este modelo, todas las colisiones con una energía E_c y momento angular total menor que el máximo J_{max}^{Cl} poseen probabilidad reactiva unitaria

$$P_{cap}(E_c, J) = 1 \quad \text{para } J < J_{max}^{Cl}. \quad (20)$$

Para un potencial del tipo (6) el valor máximo del momento angular total es [39]

$$J_{max}^{Cl} = (3\mu)^{1/2}(2C_6)^{1/6}E_c^{1/3}. \quad (21)$$

Para valores de $J > J_{max}^{Cl}$, la formación del complejo intermediario está prohibida desde el punto de vista clásico. Esto se debe a que la energía de colisión E_c es menor que el máximo valor de la energía centrífuga. Esta barrera potencial puede ser atravesada por efecto túnel según [40]

$$P_{cap}(E_c, J) = \frac{1}{1 + e^{2\theta}}, \quad (22)$$

donde θ es la integral de fase, definida por

$$\theta = \frac{2\pi}{h} \int_{R_-}^{R_+} \sqrt{2\mu(V_{eff}(R) - E_c)} dR, \quad (23)$$

tomando el potencial efectivo

$$V_{eff}(R) = \frac{J^2}{2\mu R^2} + V(R). \quad (24)$$

En estas dos últimas expresiones, $V(R)$ es el potencial de interacción entre el átomo y el diátomo y R_+ , R_- están definidos por las condiciones de existencia de la integral.

Por otra parte, el factor $P_P(v', j', \phi', E', J)$ en la expresión (17) representa la probabilidad de que el complejo intermediario se disocie, produciendo un diátomo en el estado (v', j') , a energía total E' y momento angular total J , con un ángulo de dispersión ϕ' . En el marco de la PST, esta probabilidad puede calcularse de acuerdo a lo establecido en el postulado fundamental

$$P_P(v', j', \phi', E', J) = \frac{\Omega_P(v', j', \phi', E', J)}{\Omega_R(E, J) + \Omega_P(E', J)} \quad (25)$$

en esta ecuación, $\Omega_P(v', j', \phi', E', J)$ representa el total de estados de los productos que sean consistentes con las condiciones establecidas para los mismos y $\Omega_R(E, J) + \Omega_P(E', J)$ representa el número total de estados accesibles a reaccionantes y productos. En este caso, $E = E_c + E_{v=0}$ representa el exceso de energía total con respecto al canal de los reaccionantes. El número de estados Ω_i puede ser

determinados numéricamente mediante el Método de Monte Carlo [41].

La SED total puede obtenerse de (17) por integración sobre el momento angular rotacional j' y sumatoria sobre los niveles vibracionales v'

$$\frac{d\sigma(\phi', E_c)}{d\omega} = \sum_{v'=0}^{v'_{max}} \int_0^{j'_{max}} \frac{d\sigma(v', j', \phi', E_c)}{d\omega} dj' \quad (26)$$

La Sección Eficaz Integral (SEI) *estado a estado* puede obtenerse integrando (17) sobre el ángulo de dispersión ϕ'

$$\sigma(v', j', E_c) = 2\pi \int_0^\pi \frac{d\sigma(v', j', \phi', E_c)}{d\omega} \sin \phi' d\phi', \quad (27)$$

II.3. Constante de velocidad térmica

Utilizando la expresión de la SEI *estado a estado* (27) y asumiendo una distribución de Maxwell-Boltzmann sobre las energías de colisión puede obtenerse la constante de velocidad *estado a estado* [42]

$$k_{v'j'}(T) = \left(\frac{8k_B T}{\pi\mu}\right)^{1/2} (k_B T)^{-2} \times \int_0^{+\infty} \sigma(v', j', E_c) E_c e^{-E_c/k_B T} dE_c, \quad (28)$$

donde k_B es la constante de Boltzmann.

La constante de velocidad térmica puede expresarse como el valor promedio de la constante de velocidad *estado a estado* sobre una distribución de Boltzmann de los estados ro-vibracionales (v', j') a una temperatura T

$$k(T) = \frac{1}{Q_{v'j'}} \sum_{v'=0}^{\infty} \sum_{j'=0}^{\infty} (2j' + 1) e^{-E_{v'j'}/k_B T} k_{v'j'}(T), \quad (29)$$

donde $E_{v'j'}$ es el nivel energético correspondiente al estado ro-vibracional (v', j') y $Q_{v'j'}$ es la función de partición de los estados ro-vibracionales a temperatura T

$$Q_{v'j'} = \sum_{v'=0}^{\infty} \sum_{j'=0}^{\infty} (2j' + 1) e^{-E_{v'j'}/k_B T}. \quad (30)$$

II.4. Factor de ponderación electrónica

Los valores de constante de velocidad térmica obtenidos mediante (29) no incluyen la contribución de los efectos de acoplamiento espín-órbita, los cuales separan la degeneración en los niveles energéticos de los reaccionantes $Si(\tilde{3}P_{J=0,1,2}) + OH(\tilde{2}\Pi_{\Omega=3/2,1/2})$ en 6 niveles de estructura fina, cada uno correspondiendo a $(2J + 1)$ estados espín-órbita doblemente degenerados [6]. En los experimentos cinéticos, la relajación mediante colisiones de los niveles de estructura fina de los reaccionantes es usualmente más rápida que los tiempos de reacción [17], de esta forma, dichos niveles pueden considerarse en equilibrio térmico con la

temperatura del gas. Debido al tratamiento adiabático de la SEP del sistema, solamente el estado base del mismo (X^2A') contribuye a la reactividad, por lo que se hace necesaria una corrección a los desdoblamientos producidos por los acoplamientos. Los datos cinéticos consistentes con la distribución térmica de los estados de los reaccionantes son obtenidos multiplicando $k(T)$ por un factor dependiente de la temperatura $f_e(T)$, el cual representa la probabilidad de iniciar la colisión a una T dada [43]

$$f_e(T) = \frac{g(^2A')}{[g(^3P_0) + g(^3P_1)e^{-\Delta E_1/T} + g(^3P_2)e^{-\Delta E_2/T}]} \times \frac{1}{[g(^2\Pi_{3/2}) + g(^2\Pi_{1/2})e^{-\Delta E_{OH}/T}]} \quad (31)$$

donde $g(^2A')$ es la degeneración del estado X^2A' debido a la multiplicidad de espín, $g(^3P_j) = (2J+1)$ es la degeneración de cada nivel de estructura fina Si^3P_j , y $g(^2\Pi_{1/2}) = g(^2\Pi_{3/2}) = 2$ es la degeneración de los niveles de estructura fina $OH^2\Pi_Q$. Las separaciones entre los niveles de estructura fina fueron tomadas de resultados experimentales [44], siendo $\Delta E_1 = 111K$, $\Delta E_2 = 321K$ y $\Delta E_{OH} = 201K$. El impacto del factor de ponderación electrónico puede ser anticipado analizando dos casos límite: a bajas temperaturas $f_e(T) \rightarrow 1$, mientras que a temperaturas elevadas $f_e(T) \rightarrow 1/18$ [6].

II.5. Distribuciones vibracionales y rotacionales

Las distribuciones vibracionales son obtenidas a partir de la sección eficaz vibracionalmente resuelta $\sigma(v, j \rightarrow v', E_c)$, o sea, se considera la sección eficaz involucrada en la producción de una molécula en el estado vibracional v' . Se relacionan con la SEI según

$$\sigma(v, j, E_c) = \sum_{v'} \sigma(v, j \rightarrow v', E_c). \quad (32)$$

Para garantizar una comparación adecuada con resultados obtenidos mediante otros métodos, los gráficos de las distribuciones vibracionales se muestran normalizados con respecto a la sección eficaz integral (27) a la energía de colisión dada.

Por otra parte, las distribuciones rotacionales totales (sección eficaz involucrada en la producción de una molécula en el estado rotacional j') son determinadas según

$$\sigma(v, j \rightarrow j', E_c) = \sum_{v'} \sigma(v, j \rightarrow v', j', E_c). \quad (33)$$

Al igual que en el caso anterior, los gráficos de distribuciones rotacionales se muestran normalizados con respecto a la sección eficaz integral.

III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

III.1. Canal de entrada

El ajuste del potencial promediado en el canal de entrada fue realizado siguiendo las metodologías de a1-MPPST y

a2-MPPST. El primero establece que el ajuste debe realizarse sobre toda la región de largo alcance (valores de la distancia entre las especies colisionantes $R > 3\text{\AA}$), en tanto el segundo considera la elección de regiones dependientes de la energía de colisión. Debido a las diferencias esperadas entre ambas variantes, su comparación se realizó representando en cada caso el potencial promediado y su respectivo ajuste sobre cada una de las regiones determinadas por a2-MPPST, reportándose el valor de la desviación cuadrática D correspondiente.

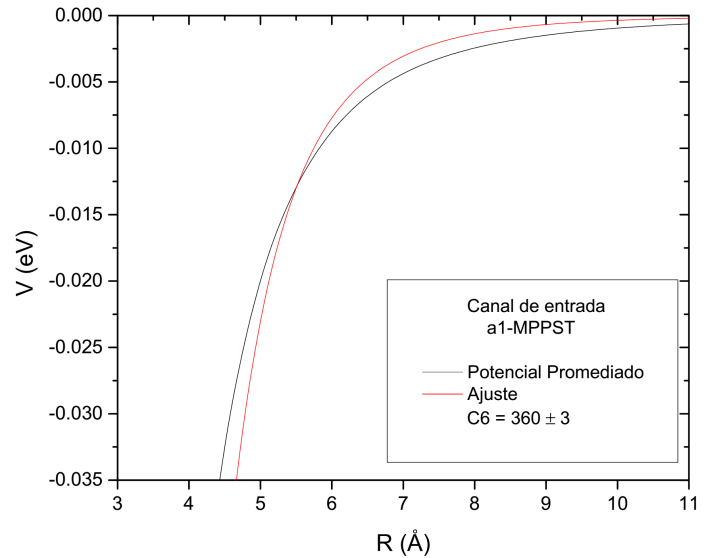


Figura 2. Potencial promediado angularmente y ajuste a potencial dispersivo para la reacción $Si + OH(v = 0, j = 0) \rightarrow SiO + H$ en el marco de a1-MPPST. Canal de entrada.

En la Figura 2 se representan el potencial promediado \bar{V} y su respectivo ajuste en el marco de a1-MPPST, en función de la distancia entre el átomo de Si y el centro de masa de OH . Puede observarse que existen desviaciones tanto positivas como negativas, siendo más pronunciadas en el intervalo de $6 - 9\text{\AA}$. El potencial ajustado es más atractivo que \bar{V} para distancias inferiores a 6\AA , por lo cual debe ocurrir una sobrestimación de las probabilidades de captura cuando las energías de colisión son elevadas. Por otra parte, para distancias mayores que 6\AA el potencial ajustado es menos atractivo que el promediado, lo cual implica la subestimación de las probabilidades de captura a bajas E_c . En estas condiciones, el valor del coeficiente C_6 obtenido es $360 \text{ eV} \times \text{\AA}^6$.

En el caso de a2-MPPST, basados en la fórmula (16) que establece que el valor del potencial en R_{max} (radio de captura) tiene un valor igual a la mitad de la E_c siempre que este potencial dispersivo pueda ser descrito analíticamente según $-C_6/R^6$, fueron seleccionadas tres regiones para realizar el ajuste, siendo notable que con el aumento de la energía de colisión, se verificara una disminución de los valores del radio de captura R_{max} comprendidos en cada una:

- Región 1: $E_c \in [1 - 5) \text{ meV}$
- Región 2: $E_c \in [5 - 10) \text{ meV}$

■ Región 3: $E_c \in [10 - 1000] \text{ meV}$

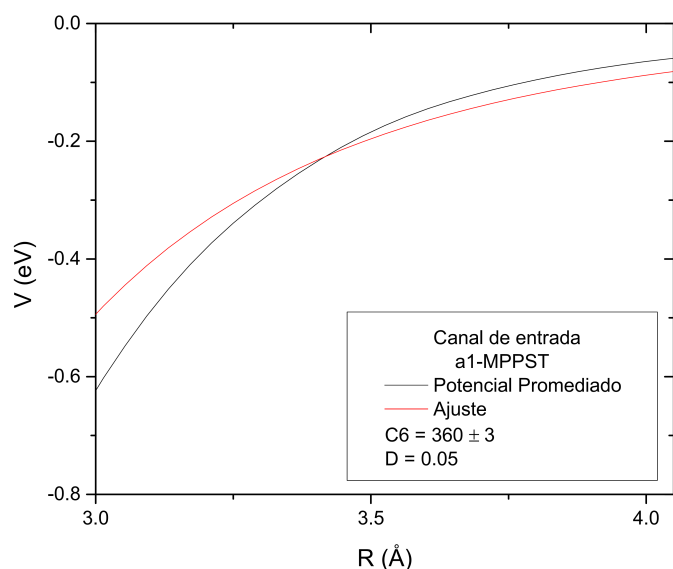
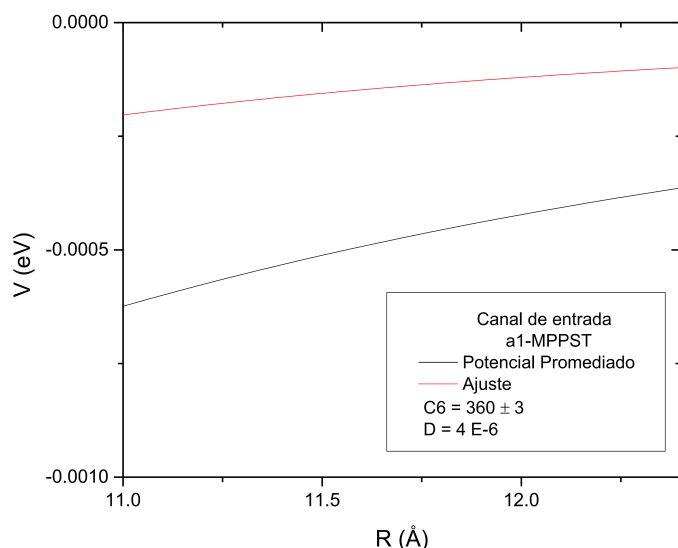


Figura 3. Comparación de los ajustes obtenidos mediante a1-MPPST (panel superior) y a2-MPPST (panel inferior) en la región de 1 a 5 meV del canal de entrada.

La Figura 3 muestra el potencial promedio $V(eV)$ y su respectivo ajuste para valores de $R(\text{Å})$ pertenecientes a la región 1 ($1 - 5 \text{ meV}$) de a1-MPPST (panel superior) y a2-MPPST (panel inferior). Puede observarse que las desviaciones en el primer caso son mucho más elevadas que en el segundo (nótese la diferencia en las escalas de V), lo cual puede corroborarse con la razón $D_{a1\text{-MPPST}}/D_{a2\text{-MPPST}} \approx 400$, o sea, el error en el ajuste realizado según a1-MPPST es como promedio 400 veces mayor que el error en el ajuste según a2-MPPST. También es considerable la diferencia entre los valores del coeficiente C_6 obtenidos, siendo $1189 \text{ eV} \times \text{Å}^6$ para a2-MPPST. En consecuencia, al considerar solo los puntos pertenecientes a la región propuesta el potencial ajustado obtenido continúa siendo menos atractivo, pero a la vez mucho más cercano al potencial promedio, por lo que la descripción física del problema está más próxima a la realidad.

De forma general, los ajustes realizados siguiendo las pautas de a2-MPPST resultaron más eficientes que los de a1-MPPST en las tres regiones propuestas (consultar el Anexo para los análisis en las regiones 2 y 3). Los valores de C_6 que determinan el comportamiento del potencial utilizado para los cálculos dinámicos variaron dependiendo de la región y por consecuencia, de la energía de colisión, corroborando el comportamiento esperado.

III.2. Canal de salida

Al igual que en el acápite anterior, el ajuste en el canal de salida fue realizado según las metodologías de a1-MPPST y a2-MPPST. Como fue señalado con anterioridad, las características de la SEP en este caso imposibilitan la realización de un ajuste con calidad comparable a la del canal de entrada; no obstante, su división en regiones dependientes de la energía de colisión podría introducir mejoras en el resultado.

La Figura 4 muestra el gráfico del potencial promedio \bar{V} y el ajuste a un potencial dispersivo respecto a la distancia R entre el átomo de Si y el centro de masas del diátomo OH , para la variante a1-MPPST. Puede notarse en este caso la presencia de grandes desviaciones de signo positivo y negativo, más prominentes en el intervalo de $6 - 8 \text{ Å}$.

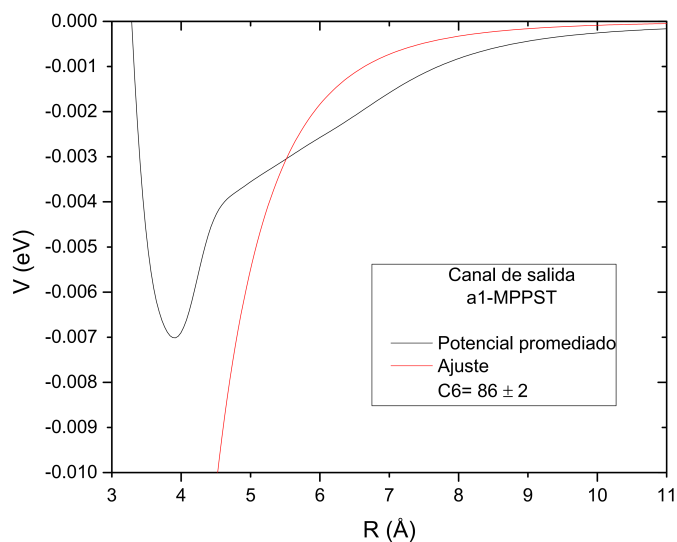


Figura 4. Potencial promedio angularmente y ajuste a potencial dispersivo para la reacción $Si + OH(v=0, j=0) \rightarrow SiO + H$ en el marco de a1-MPPST. Canal de salida.

El potencial ajustado es mucho más atractivo que el potencial promedio para las $R < 5 \text{ Å}$ y un poco menos atractivo para $R > 5 \text{ Å}$; luego, la utilización del potencial ajustado en la determinación de los observables implica que el complejo $SiOH$ se forme con mayor fortaleza que en la realidad y que los productos $SiO + H$ se separen mucho más rápido. El valor del coeficiente C_6 correspondiente es de $86 \text{ eV} \times \text{Å}^6$.

Siguiendo el procedimiento establecido por a2-MPPST, se realizó la división del ajuste en regiones dependientes de la energía de colisión, lo cual implicó grandes dificultades

para las energías de colisión superiores a 5 meV , pues en este caso los radios de captura obtenidos están contenidos en el intervalo de $2.2 - 3.6 \text{ \AA}$ donde el potencial promediado presenta una barrera, la cual no puede ser descrita correctamente por un potencial dispersivo ($-C_6/R^6$). En consecuencia, el ajuste para estas energías se realizó a partir de 4.5 \AA , donde dicho potencial comienza a mostrar un comportamiento acorde con los requerimientos del MPPST. Atendiendo a lo anterior, la selección fue

- Región 1: $E_c \in [1 - 5] \text{ meV}$
- Región 2: $E_c > 5 \text{ meV}$

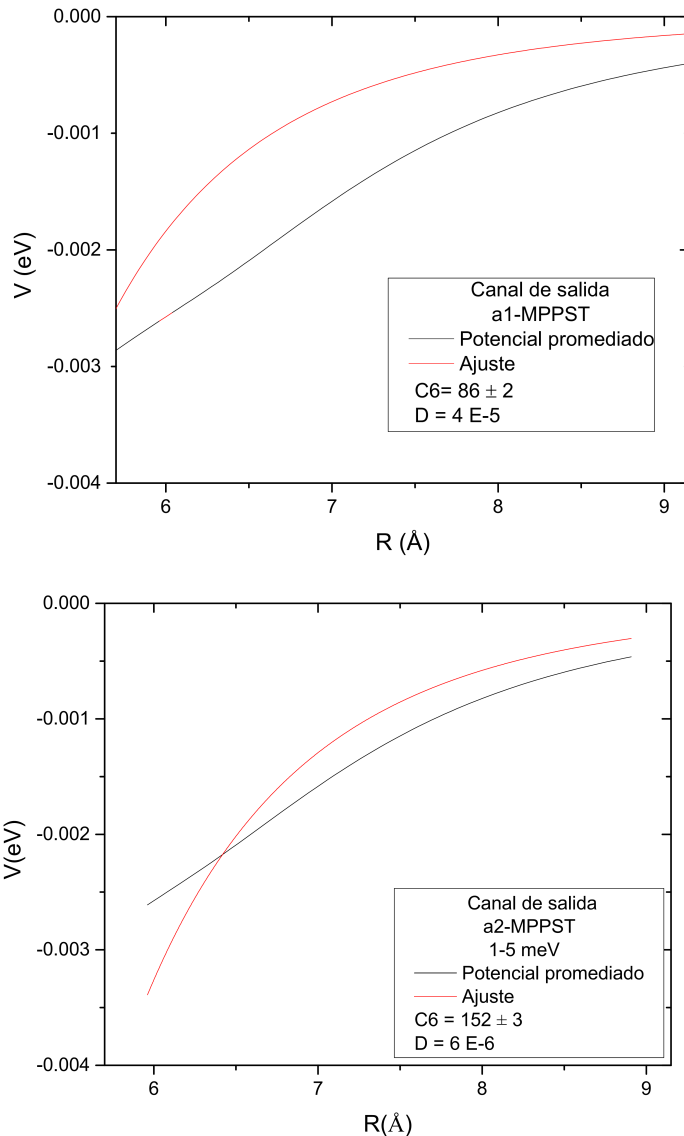


Figura 5. Comparación de los ajustes obtenidos mediante a1-MPPST (panel superior) y a2-MPPST (panel inferior) en la región de 1 a 5 meV del canal de salida.

En la Figura 5 se representan el potencial promediado \bar{V} y su ajuste para valores de distancias R pertenecientes a la región 1 ($1 - 5 \text{ meV}$) de a1-MPPST (panel superior) y a2-MPPST

(panel inferior). La razón entre las desviaciones cuadráticas de ambos ajustes es en este caso $D_{a1-MPPST}/D_{a2-MPPST} = 7$, lo que significa que el error en el ajuste realizado según a1-MPPST es como promedio 7 veces mayor que el error en el ajuste según a2-MPPST. El valor del coeficiente C_6 obtenido en este caso para a2-MPPST es $152 \text{ eV} \times \text{\AA}^6$.

En el canal de salida, al igual que en el de entrada, los ajustes realizados con las especificaciones de a2-MPPST resultaron más efectivos en todos los casos, presentando siempre menores desviaciones cuadráticas (consultar el Anexo para el análisis en la región 2). Los coeficientes C_6 obtenidos por esta variante deben posibilitar una determinación más realista de los observables de interés para el sistema de estudio, como será verificado en las siguientes secciones.

III.3. Sección eficaz integral

Las secciones eficaces integrales $\sigma(v = 0, j = 0, E_c)$ para la reacción $\text{Si} + \text{OH}(v = 0, j = 0) \rightarrow \text{SiO} + \text{H}$ obtenidas por los métodos a1-MPPST, a2-MPPST, n-MPPST y QCT [6] aparecen representadas en la Figura 6. Como puede apreciarse, el comportamiento de los datos en los cuatro casos evidencia la ausencia de barreras energéticas en el sistema, observándose un decrecimiento monótono de los valores de las SEI con el aumento de la energía de colisión E_c .

Resulta notable que las SEI determinadas por n-MPPST sean menores que las determinadas por a1-MPPST y a2-MPPST (para energías superiores a 30 meV), pues su aplicación suponía un mayor acercamiento a la realidad física del sistema³. Una posible explicación de este fenómeno puede estar fundamentada en la inestabilidad numérica [45] que presenta en algunos casos el algoritmo de resolución de sistemas de ecuaciones con matrices tridiagonales (algoritmo de Thomas), necesario para realizar la interpolación.

Las tres variantes del MPPST presentan valores de SEI superiores a los determinados mediante QCT, lo cual puede ser justificado atendiendo a las probabilidades de reacción obtenidas por cada método: la MPPST asume que una vez formado el complejo intermediario, el producto se forma con una probabilidad del 100%; sin embargo los estudios del sistema de interés desarrollados mediante QCT y TDWP [5] evidencian la existencia de retrodisociaciones, en algunos casos de hasta el 50%, lo cual conduce a bajas probabilidades de reacción comprendidas entre $0.4 - 0.54$ [6].

Al multiplicar las SEI obtenidas mediante cada una de las variantes de MPPST por las probabilidades de reacción $P_r(v = 0, j = 0)$ en función de la energía de colisión reportadas por QCT [5, 6], la correspondencia entre los resultados aumenta drásticamente. La Figura 7 representa la situación anterior en escala logarítmica de los valores de energía de colisión, en aras de que la comparación resulte más evidente. Puede observarse que los valores obtenidos por a2-MPPST y n-MPPST están más cercanos a los de QCT en la región de las bajas energías; con el aumento de la E_c , la concordancia entre las cuatro metodologías se eleva notablemente. Este

³Esta mejora se sustenta en la interpolación mediante *spline cúbico* de los valores del potencial promediado, en lugar de su ajuste global.

hecho demuestra la gran influencia del ajuste realizado al potencial promediado en la región de las bajas energías, pues los resultados de a1-MPPST son los de menor calidad para dicha región en ambos canales (Ver sección anterior).

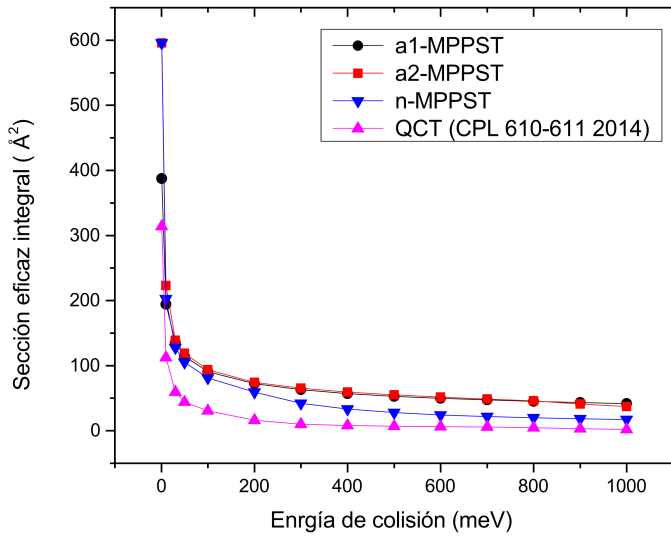


Figura 6. Secciones eficaces integrales como función de la energía de colisión para la reacción $Si+OH(v=0, j=0) \rightarrow SiO+H$. Comparación entre los resultados de a1-MPPST, a2-MPPST, n-MPPST y QCT(CPL 610-611 2014)

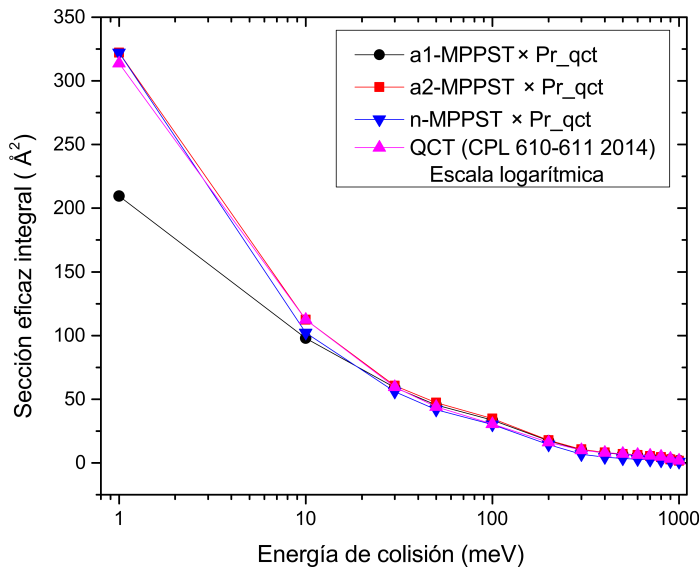


Figura 7. Comparación entre los resultados de a1-MPPST, a2-MPPST, n-MPPST (multiplicados por la probabilidad de reacción obtenida mediante QCT) y QCT(CPL 610-611 2014). Dependencia energética en escala logarítmica.

Con el fin de establecer un criterio más adecuado para realizar la comparación anterior, en la Figura 8 se representa la dependencia energética (en escala logarítmica) del valor absoluto de las diferencias entre las SEI determinadas por MPPST y las determinadas por QCT

$$\Delta SEI = |\sigma_{MPPST}(v=0, j=0) - \sigma_{QCT}(v=0, j=0)|, \quad (34)$$

donde $\sigma_{MPPST}(v=0, j=0)$ representa los valores de sección eficaz integral (multiplicados por la probabilidad de reacción

P_r , obtenida mediante QCT) para a1-MPPST, a2-MPPST y n-MPPST, según sea el caso.

Como se observa, las mayores $\Delta SEI_{a1-MPPST}$ están en la región de bajas energías, lo cual pudiese atribuirse a la menor calidad del ajuste del potencial promediado en esta región. Por otra parte, las $\Delta SEI_{a2-MPPST}$ son las menores para todas las E_c excepto las comprendidas entre 50 y 200 meV, donde las de a1-MPPST son ligeramente inferiores. Finalmente, las $\Delta SEI_{n-MPPST}$ son las mayores para todas las energías de colisión, corroborando la posible existencia de una inestabilidad numérica en el método. Los resultados anteriores confirman que las SEI obtenidas por a2-MPPST están en mayor concordancia con las obtenidas por QCT [5,6], lo cual avala los argumentos presentados en la Sección II.1.

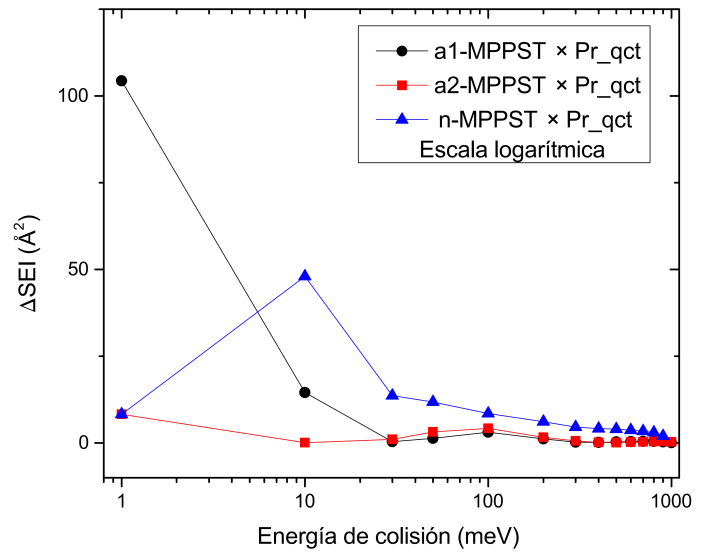


Figura 8. Valores de ΔSEI de los métodos a1-MPPST, a2-MPPST, n-MPPST (multiplicadas por la probabilidad de reacción obtenida mediante QCT). Dependencia energética en escala logarítmica.

En general, la aplicación del MPPST no reproduce correctamente los resultados obtenidos mediante QCT para el sistema $Si + OH$, lo cual se debe a las características especiales que presenta la SEP del mismo. En las reacciones de inserción más comunes, la probabilidad es cercana a 1 y no existen eventos de retrodisociación, por lo que el MPPST produce resultados mucho más precisos [4, 36, 39, 46–48]. Es necesario destacar que el hecho de multiplicar los valores de SEI obtenidos mediante MPPST por las P_r de QCT posee un fin meramente ilustrativo: la ventaja fundamental del MPPST es la rapidez con la que realiza la determinación de los observables (pocos requerimientos computacionales), por tanto, carece de sentido realizar un cálculo QCT de mayores requerimientos para obtener las probabilidades de reacción. Sin embargo, a pesar de sobrestimar las SEI y no considerar los eventos de retrodisociación, el MPPST ofrece información muy valiosa sobre las características dinámicas del sistema en consideración, constituyendo una excelente primera aproximación a la física de los problemas de colisiones triatómicas.

En la sección siguiente serán expuestos y discutidos los valores de constante de velocidad térmica obtenidos por las

tres variantes del MPPST. Debe prestarse especial atención al hecho de que, según los resultados obtenidos anteriormente, la descripción más real⁴ del sistema debe ser la ofrecida por a2-MPPST.

III.4. Constante de velocidad térmica

La constante de velocidad térmica $k(T)$ fue obtenida a partir de los valores de constante de velocidad *estado a estado* $k_{vj}(T)$ mediante un método indirecto⁵, el cual consiste en la integración numérica de la ecuación (28) utilizando funciones de excitación (dependencia energética de la sección eficaz integral) analíticas de la forma [5]

$$\sigma(v, j, E_c) = A(E_c - E_0)^n e^{-m(E_c - E_0)}, \quad (35)$$

donde A, m, n, E_0 son parámetros dependientes del ajuste por mínimos cuadrados⁶ realizado sobre los datos de sección eficaz integral; los mismos se reportan en la Tabla 1 para las SEI obtenidas por las tres variantes del MPPST y sus respectivos productos por la probabilidad de reacción de QCT.

Tabla 1. Valores de los parámetros de ajuste.

	A ($\text{\AA}^2/\text{meV}^n$)	n	m (meV^{-1})	E_0 (meV)
a1-MPPST	50.4	-0.332	0.25	-1.07×10^{-05}
a2-MPPST	43.2	-0.364	-1.02	0
n-MPPST	38.0	-0.370	23.9	0
a1-MPPST $\times P_r$	11.4	-0.441	55.3	-3.88×10^{-05}
a2-MPPST $\times P_r$	10.3	-0.461	53.4	4.31×10^{-08}
n-MPPST $\times P_r$	9.60	-0.462	82.3	0

Las funciones de excitación propuestas corresponden realmente a un modelo de SEI típico de reacciones con barrera energética, como lo demuestra la presencia del sumando E_0 en la fórmula (35). Su utilización puede justificarse atendiendo a que la inclusión de dicho sumando aumenta considerablemente la calidad del ajuste obtenido (nótese que en todos los casos el valor de E_0 es cero o está muy próximo a él, indicando que en realidad la reacción no presenta barreras). Adicionalmente, dichas funciones fueron empleadas en las determinaciones realizadas por QCT, lo cual incentivó su utilización en aras de garantizar una óptima comparación de los resultados. Es importante señalar que en la integración realizada en el marco de la MPPST todos los valores de $k_{vj}(T)$ son iguales, es decir, no existe dependencia explícita con v y j . Este hecho concuerda con uno de los principales postulados de la teoría: una vez formado el

complejo de transición, las condiciones iniciales del sistema son irrelevantes.

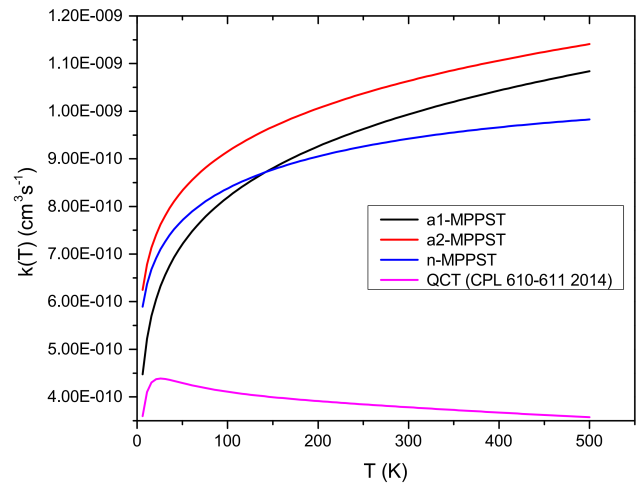


Figura 9. Constante de velocidad térmica $k(T)$ para la reacción $Si + OH(v = 0, j = 0) \rightarrow SiO + H$. Comparación entre los resultados de a1-MPPST, a2-MPPST, n-MPPST y QCT(CPL 610-611 2014)

La Figura 9 muestra los valores de constante de velocidad térmica contra la temperatura obtenidos mediante a1-MPPST, a2-MPPST, n-MPPST y QCT. Como puede observarse, los valores de $k(T)$ aumentan rápidamente con el aumento de T hasta aproximadamente 100 K, donde comienza a ralentizarse su crecimiento. Las curvas de MPPST carecen de máximo y están muy por encima de la de QCT, lo cual es consecuencia directa de la diferencia entre los valores de las SEI obtenidas por cada método.

Los resultados de ambos métodos son comparables si se realiza el ajuste de las SEI multiplicadas por $P_r(QCT)$. En la Figura 10 se representa la situación anterior; obsérvese que pese a la disminución de los valores obtenidos por MPPST (notar el cambio de escala en el gráfico) aún existen diferencias sustanciales entre su comportamiento y el de QCT, siendo las desviaciones de a1-MPPST y a2-MPPST las más pronunciadas. Estas diferencias son consecuencia directa de las particularidades de los métodos: en el marco de QCT la integración se realiza considerando los 14 estados rotacionales que pueden ser poblados en el OH para el intervalo de temperaturas estudiado, lo cual implica la existencia de 14 correspondientes $k_{vj}(T)$ con diferentes influencias⁷ sobre la $k(T)$ [6]. Por otra parte, en el MPPST se realiza la sumatoria sobre j considerando solo la $k_{v=0, j=0}(T)$, sin tener en cuenta la influencia de los diferentes estados rotacionales en la integración, pues dicho método supone que los observables de la reacción no dependen del estado inicial de los reaccionantes.

Con el fin de obtener constantes de velocidad térmica comparables con las experimentales se hace necesario incluir

⁴Recuérdese que la determinación de los observables restantes depende del valor de la $\sigma(v = 0, j = 0, E_c)$ determinado; luego, los resultados de dichos observables para a1-MPPST y n-MPPST deben presentar mayores desviaciones con respecto al comportamiento real.

⁵En el marco de la TST [32] la $k(T)$ puede ser obtenida directamente utilizando los flujos de las trayectorias. La elección del método indirecto está orientada a seguir el mismo procedimiento que en QCT y TDWP.

⁶Este tipo de ajuste se conoce como ajuste no lineal [49], el mismo representa un reto computacional y en ocasiones los resultados pueden ser poco precisos.

⁷En el intervalo de temperaturas de 5 – 500 K aproximadamente el 90 % de la población de los estados rotacionales se encuentra entre $j = 0$ y $j = 7$; lo cual justifica la influencia de las $k_{vj}(T)$.

los efectos de los acoplamientos espín-órbita, lo cual se logra multiplicando los valores de $k(T)$ por el denominador factor de ponderación electrónica $f_e(T)$. La Figura 11 representa los resultados del procedimiento anterior aplicado a las $k(T)$ obtenidas a partir de las $\sigma_{MPPST} \times P_r$, donde $MPPST$ representa cada una de las tres variantes según sea el caso.

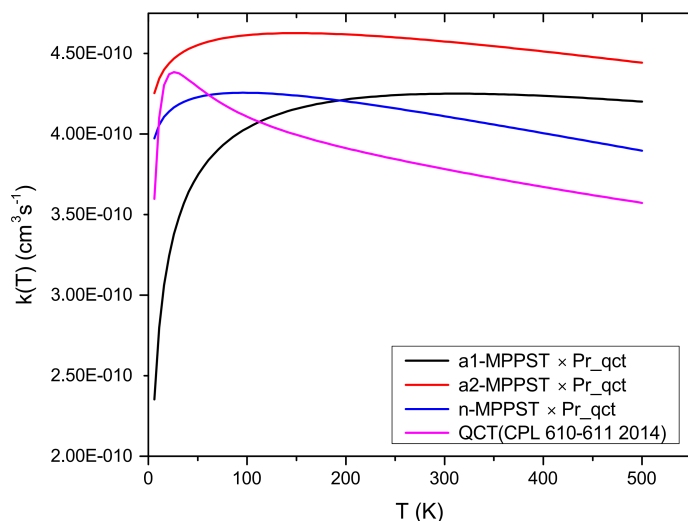


Figura 10. Constante de velocidad térmica $k(T)$ para la reacción $Si + OH(v = 0, j = 0) \rightarrow SiO + H$. Comparación entre los resultados de a1-MPPST, a2-MPPST, n-MPPST (multiplicados por $P_r(QCT)$) y QCT(CPL 610-611 2014).

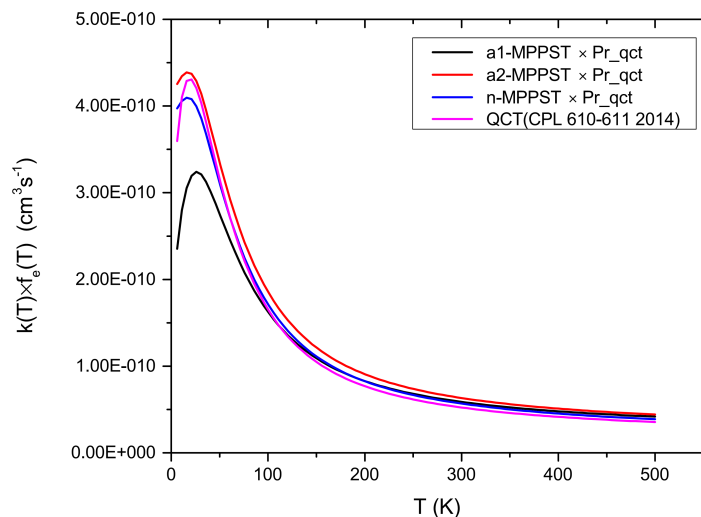


Figura 11. Constante de velocidad térmica ponderada $k(T) \times f_e(T)$ para la reacción $Si + OH(v = 0, j = 0) \rightarrow SiO + H$. Comparación entre los resultados de a1-MPPST, a2-MPPST, n-MPPST (multiplicados por $P_r(QCT)$) y QCT(CPL 610-611 2014).

Puede observarse que todas las curvas muestran un rápido crecimiento hasta aproximadamente 30 K, donde presentan su máximo (alrededor de 4.3×10^{-10} para a2-MPPST); luego de este punto, comienzan un decrecimiento monótono y amortiguado hasta los 500 K. A bajas temperaturas los valores obtenidos por a2-MPPST son los más cercanos a los de QCT, siendo los de a1-MPPST los que tienen una mayor desviación. Con el aumento gradual de la temperatura, los valores de QCT descienden con mayor rapidez que los de las tres

variantes del MPPST, exhibiendo desviaciones mucho más ligeras a altas T .

Nuevamente se confirma que para la reacción $Si + OH$ el MPPST, debido a su fuerte basamento estadístico, presenta limitaciones en la descripción de la dinámica del sistema comparado con el método QCT. Al igual que las secciones eficaces integrales, las constantes de velocidad térmica obtenidas por MPPST, aunque son numéricamente más elevadas, reflejan el mismo comportamiento que las determinadas por QCT. Sin embargo, conocer la tendencia del comportamiento de un observable puede ser crucial para determinaciones más precisas del mismo; la gran importancia del MPPST es precisamente que ofrece dicha información a un costo computacional ínfimo.

La determinación de la constante de velocidad térmica es crucial para el desarrollo de modelos físico-químicos en el marco de la astrofísica moderna, pues su aplicación macroscópica directa permite la obtención de las leyes de velocidad y consecuentemente, las concentraciones de las diferentes moléculas presentes en el MI. Dada la ausencia de datos experimentales para el sistema $Si + OH$, los resultados obtenidos en este trabajo y en sus antecedentes [5, 6] representan un gran paso en el perfeccionamiento de las bases de datos utilizadas para modelar la química del MI [50, 51], los cuales no reproducen correctamente las características de la reacción reportando un valor de la $k(T) = 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ independiente de la temperatura, en franca contraposición al perfil obtenido en nuestra investigación.

III.5. Distribuciones vibracionales

Las distribuciones vibracionales de los productos de la reacción $Si + OH(v = 0, j = 0) \rightarrow SiO + H$ fueron obtenidas según la metodología descrita anteriormente en la segunda sección. Son mostrados solo los resultados a2-MPPST pues, como fue comprobado anteriormente, es la aproximación que mejor describe las características de la reacción objeto de estudio.

La Figura 12 muestra las distribuciones obtenidas por los métodos a2-MPPST y QCT [5, 6], normalizadas con respecto a la sección eficaz integral total a diferentes energías. Para esta reacción hay abiertos una gran cantidad de canales vibracionales ($v' = 30$), esto es resultado de su elevada exotermicidad y de la gran diferencia de masa existente entre los reaccionantes y los productos.

Pueden observarse diferencias considerables entre los resultados de ambos métodos a bajas energías de colisión (10 – 100 meV). Las distribuciones determinadas por MPPST reflejan un típico comportamiento estadístico, apreciándose una disminución monótona en la probabilidad de reacción con el aumento de v' . Por otra parte, las distribuciones obtenidas por QCT muestran un comportamiento invertido (no estadístico) con un pico de probabilidad en los estados

vibracionales que van desde $v' = 15$ hasta $v' = 20$.

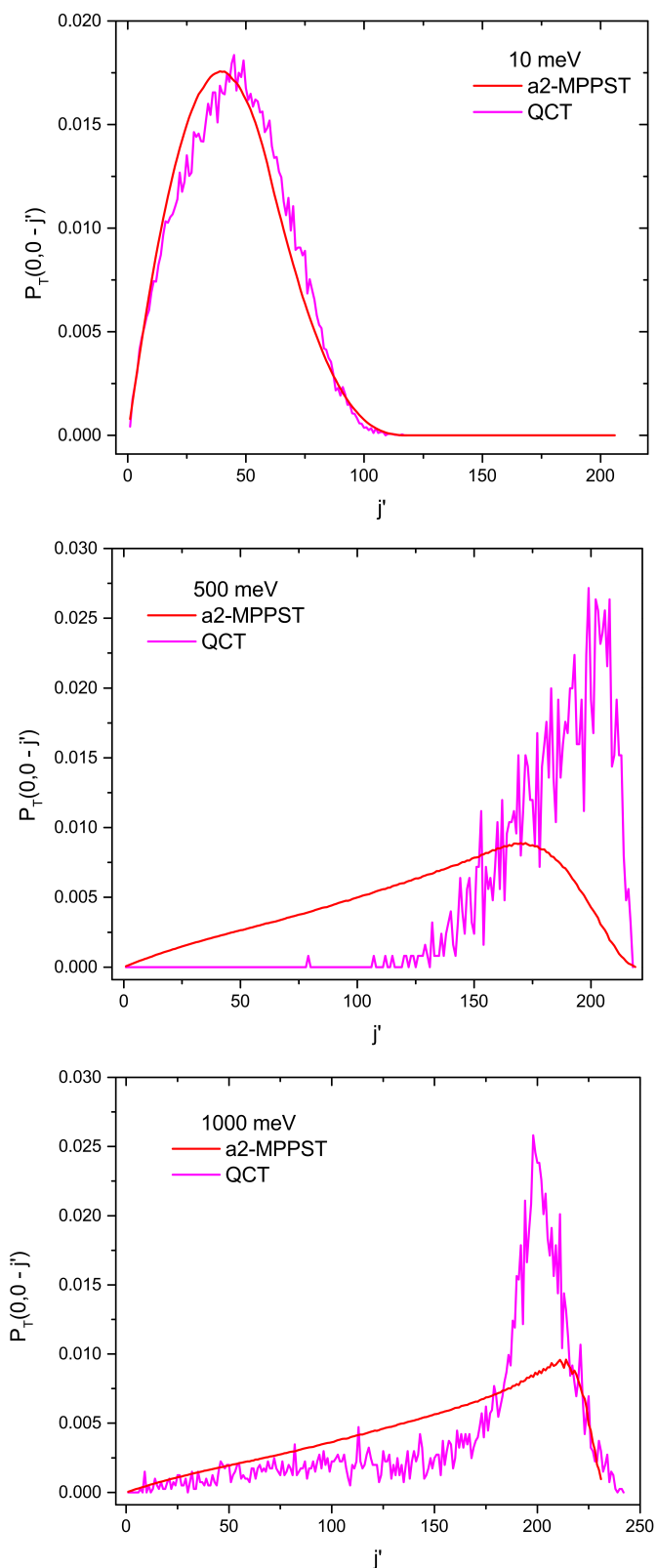


Figura 12. Distribuciones vibracionales normalizadas de los productos de la reacción $Si + OH(v = 0, j = 0) \rightarrow SiO + H$, obtenidas por a2-MPPST y QCT(CPL 610-611 2014) a 10, 500 y 1000 meV.

La comparación entre las distribuciones obtenidas por cada método a energías más elevadas evidencia un mejor acuerdo. Los resultados indican que con el aumento de la E_c los estados

vibracionales más bajos tienen una mayor probabilidad de ocupación, comportamiento que puede ser identificado como estadístico, pero que puede tener como origen las restricciones cinemáticas a la que están sujetas las reacciones del tipo $H + HL$ [5].

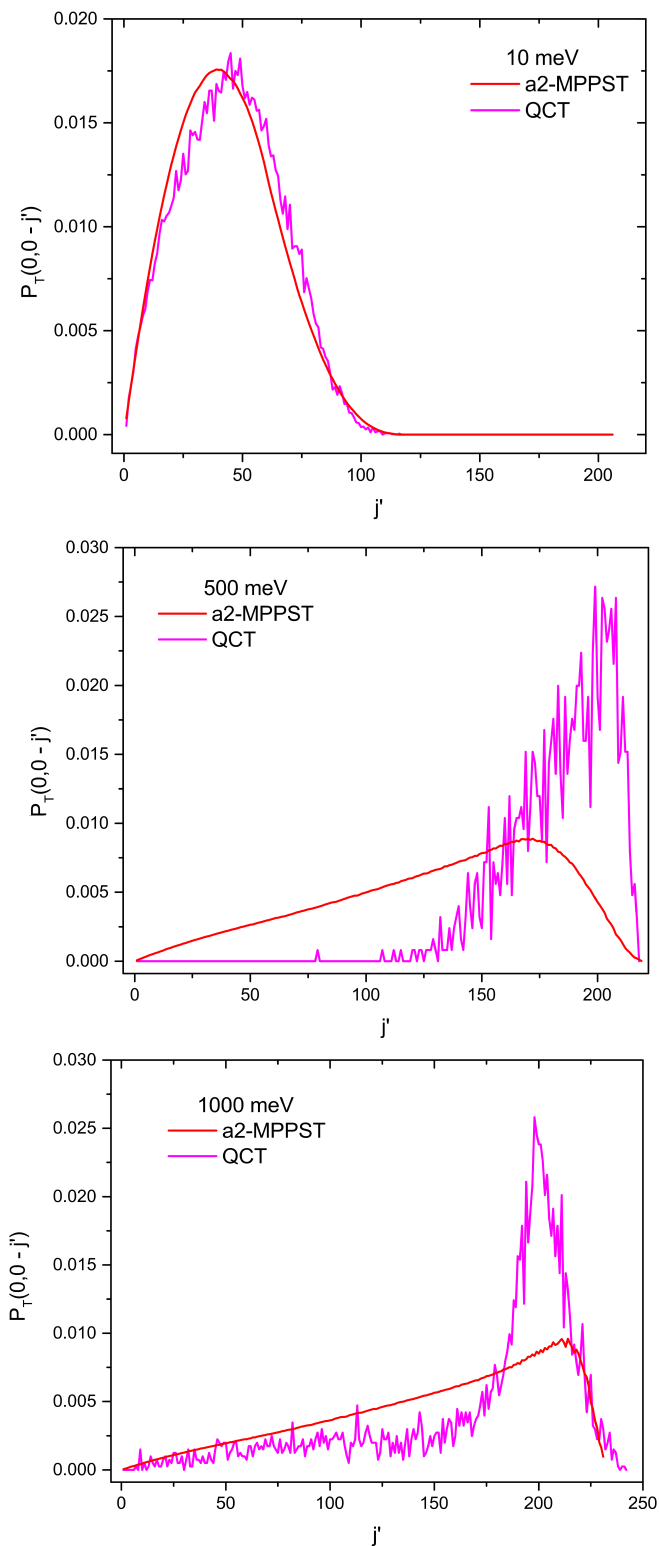


Figura 13. Distribuciones rotacionales totales de los productos de la reacción $Si + OH(v = 0, j = 0) \rightarrow SiO + H$, obtenidas por a2-MPPST y QCT(CPL 610-611 2014) a 10, 500 y 1000 meV.

Este tipo de reacciones (del inglés Heavy + Heavy-Light \rightarrow

Heavy-Heavy + Light) se caracteriza por presentar masas reducidas muy diferentes en los canales de entrada y salida [52], lo que implica que el movimiento relativo de los reaccionantes controle casi completamente los valores del momento angular total J . La anterior condición vinculada con la ley de conservación del momento angular $J = J'$ trae como consecuencia una transferencia entre el momento angular orbital de los reaccionantes y el momento angular rotacional del diátomo producto $L \approx j'$; de forma tal que a elevadas E_c , casi toda la energía disponible se encuentra en forma de energía rotacional de los productos [53, 54].

III.6. Distribuciones rotacionales

Las distribuciones rotacionales totales de los productos de la reacción $Si + OH(v = 0, j = 0) \rightarrow SiO + H$ fueron obtenidas según la metodología descrita anteriormente en la segunda sección. Al igual que en el apartado anterior y por las mismas razones solo son mostrados los resultados de a2-MPPST.

La Figura 13 muestra dichas distribuciones obtenidas por los métodos a2-MPPST y QCT [5, 6], normalizadas con respecto a la sección eficaz integral total a diferentes energías. De forma global, es notable la gran excitación rotacional que adquieren los productos de la reacción estudiada. A bajas energías de colisión el acuerdo entre las distribuciones determinadas por ambos métodos es muy elevado. Las curvas obtenidas en este caso poseen forma de campana y están poblados los estados rotacionales hasta $j' = 150$ aproximadamente.

Con el aumento de la E_c los resultados de MPPST se desvían notablemente de los de QCT, siendo los de este último mucho más elevados. La forma de las distribuciones se distorsiona y aparece un pico en los valores de j' más elevados, seguido de una brusca disminución en la probabilidad.

Los resultados anteriores reflejan que con el aumento de la E_c los estados rotacionales más elevados tienen una mayor probabilidad de ocupación. Dicho comportamiento puede ser justificado por la transferencia de L a j' que tiene lugar en la reacción. Nuevamente se evidencian las características del tipo $H + HL$ [5] presentadas por el sistema objeto de estudio.

IV. CONCLUSIONES

En el presente trabajo se realizó el estudio teórico de la dinámica de la colisión reactiva $Si(^3P) + OH(X^2\Pi) \rightarrow SiO(X^1\Sigma^+) + H(^2S)$ mediante el Método del Potencial Promedio del Espacio de Fase (MPPST) en las variantes analíticas (a1-MPPST y a2-MPPST) y numérica (n-MPPST). Con este fin fue utilizada una SEP [25] desarrollada para el estado electrónico base X^2A' del sistema $HSiO/SiOH$. La reacción fue estudiada en un amplio intervalo de energías (1 – 1000 meV) y temperaturas (5 – 500 K) para el estado ro-vibracional base del OH ($v = 0, j = 0$); obteniéndose los observables sección eficaz integral (SEI), constante de velocidad térmica $k(T)$ y distribuciones ro-vibracionales. La división del ajuste del potencial promediado a un potencial dispersivo de la forma $-C_6/R^6$ considerando regiones dependientes de la energía de colisión (marco de a2-MPPST)

produjo resultados de mayor calidad que los obtenidos mediante el ajuste tradicional (marco de a1-MPPST), tanto en el canal de entrada como en el de salida.

Las secciones eficaces integrales (SEI) obtenidas mediante a1-MPPST, a2-MPPST y n-MPPST muestran un comportamiento típico de reacción sin barrera. A bajas energías de colisión (E_c), los valores de SEI obtenidos son muy elevados, particularmente los de a2-MPPST; con el aumento gradual de la E_c los resultados de las tres variantes decrecen con un comportamiento asintótico, minimizándose las desviaciones entre ellos. Las SEI obtenidas por MPPST en cada una de sus variantes fueron mayores que las reportadas por la literatura (QCT [5, 6]); lo cual es consecuencia directa de la concepción estadística del método. Las comparaciones realizadas multiplicando las SEI de las tres variantes MPPST por la probabilidad de reacción $P_r(QCT)$ [5, 6] elevaron el acuerdo con los resultados presentes en la literatura, siendo los de a2-MPPST los de mayor correspondencia.

Las constantes de velocidad térmica $k(T)$ obtenidas mediante a1-MPPST, a2-MPPST y n-MPPST presentan comportamientos similares, creciendo rápidamente con el aumento de la temperatura T y luego adoptando un comportamiento asintótico. Las $k(T)$ obtenidas por MPPST en cada una de sus variantes fueron mayores que las reportadas por la literatura (QCT [5, 6]). Al incluir los efectos de los acoplamiento espín-órbita, las curvas $k(T) \times P_r(QCT) \times f_e(T)$ para las variantes MPPST presentan un rápido crecimiento a bajas T , seguidas de un máximo (4.3×10^{-10} para a2-MPPST) y luego un decrecimiento brusco con el aumento de la temperatura.

Las distribuciones vibracionales obtenidas por a2-MPPST presentan un típico comportamiento estadístico y evidencian que los estados vibracionales más bajos tienen mayor probabilidad de ocupación a altas energías. Su comparación con los resultados reportados por la literatura (QCT [5, 6]) muestra que existen discrepancias entre ambos a bajas energías de colisión, las cuales disminuyen con el aumento de E_c . Las distribuciones rotacionales obtenidas por a2-MPPST presentan un típico comportamiento estadístico y evidencian que los estados rotacionales más elevados tienen mayor probabilidad de ocupación a altas energías. Su comparación con los resultados reportados por la literatura (QCT [5, 6]) muestra que existe un gran acuerdo entre ambos a bajas energías de colisión. Con el aumento de E_c las desviaciones se hacen notables.

Entre las tres variantes del método MPPST utilizadas, quedó demostrado que a2-MPPST es la que describe de manera más precisa la dinámica de colisiones reactivas como la abordada en esta investigación. Por esta razón, proponemos la elección de dicha variante para desarrollar el estudio teórico de reacciones triatómicas donde intervengan complejos de larga vida media.

V. ANEXOS

V.1. Ajuste del potencial dispersivo. Regiones 2 y 3 de canal de entrada

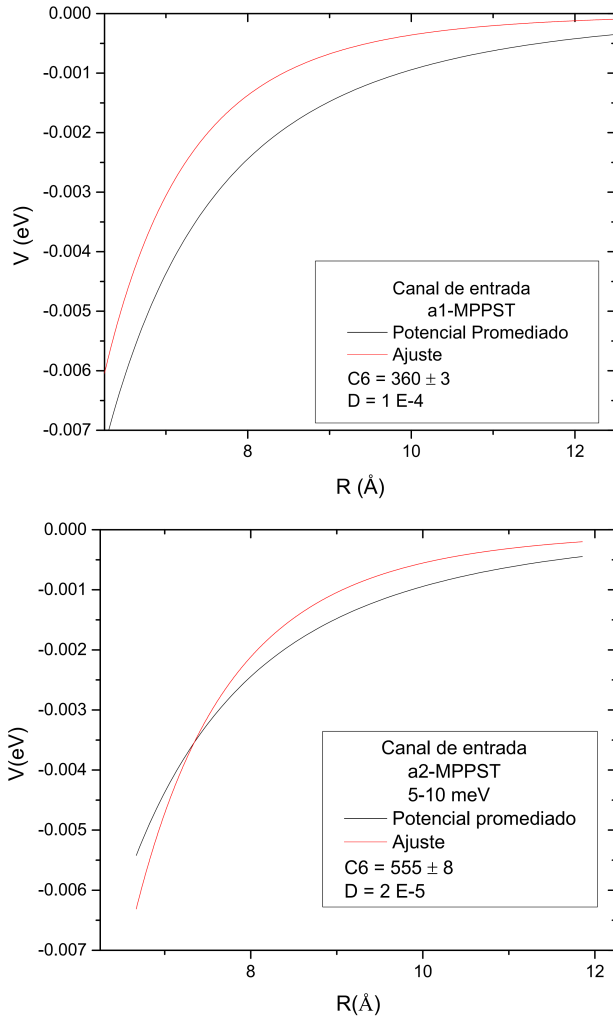


Figura 14. Comparación de los ajustes obtenidos mediante a1-MPPST (panel superior) y a2-MPPST (panel inferior) en la región de 5 a 10 meV del canal de entrada.

El análisis para la región 2 ($5 - 10 \text{ meV}$) se realiza en la Figura 14, la cual representa el potencial promediado \bar{V} y su respectivo ajuste en función de R para a1-MPPST (panel superior) y a2-MPPST (panel inferior). Las desviaciones en este caso son mucho menos pronunciadas, aunque todavía menores en a2-MPPST, como lo muestra la razón $D_{a1-MPPST}/D_{a2-MPPST} \approx 5$, o sea, el error en el ajuste realizado según a1-MPPST es como promedio 5 veces mayor que el error en el ajuste según a2-MPPST. Los valores del coeficiente C_6 se encuentran menos distanciados, siendo $555 \text{ eV} \times \text{Å}^6$ para a2-MPPST.

La Figura 15 representa el potencial promediado \bar{V} y su respectivo ajuste en función de la distancia R comprendida en la región 3 ($10 - 1000 \text{ meV}$) de a1-MPPST (panel superior) y a2-MPPST (panel inferior). Como puede observarse, esta región contiene menores diferencias entre los valores de desviación cuadrática que las dos anteriores. Así lo muestra la

fracción $D_{a1-MPPST}/D_{a2-MPPST} \approx 2$, lo que significa que el error en el ajuste realizado según a1-MPPST es como promedio 2 veces mayor que el error en el ajuste según a2-MPPST. El valor del coeficiente C_6 obtenido para a2-MPPST es $400 \text{ eV} \times \text{Å}^6$; también el más próximo al de a1-MPPST.

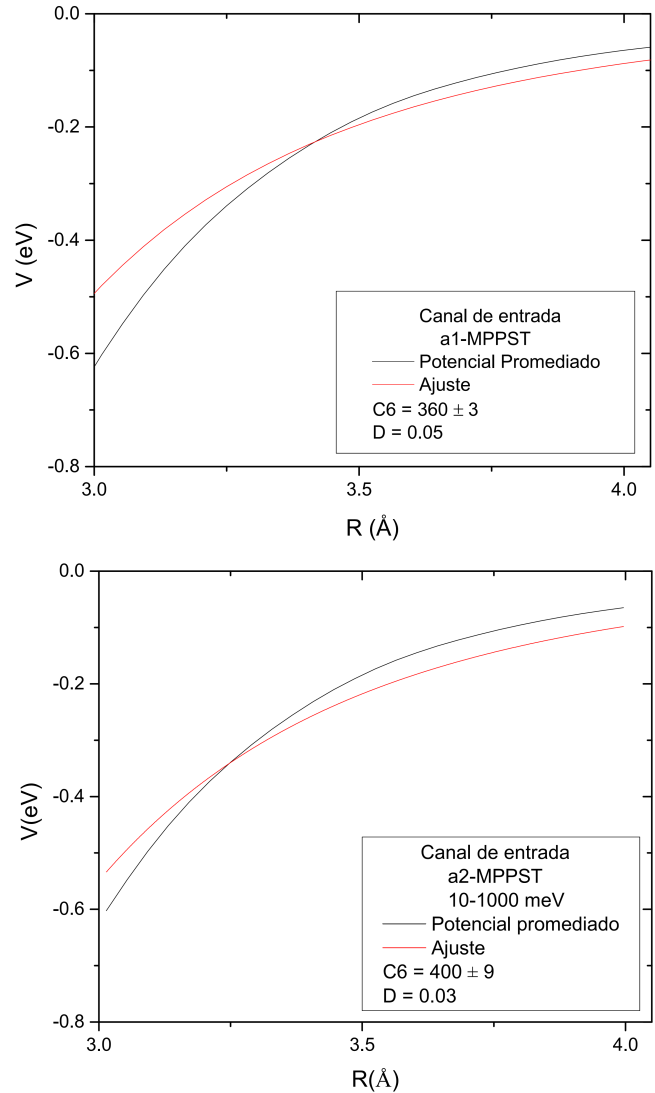


Figura 15. Comparación de los ajustes obtenidos mediante a1-MPPST (panel superior) y a2-MPPST (panel inferior) en la región de 10 a 1000 meV del canal de entrada.

V.2. Ajuste del potencial dispersivo. Región 2 de canal de salida

La Figura 16 contiene los gráficos del potencial promediado \bar{V} y su ajuste en función de las distancias pertenecientes a la región 2 ($E_c > 5 \text{ meV}$) de a1-MPPST (panel superior) y a2-MPPST (panel inferior). En este caso también se observan desviaciones importantes entre ambas variantes, siendo nuevamente el a2-MPPST más efectivo, como se evidencia en la razón $D_{a1-MPPST}/D_{a2-MPPST} = 4$, o sea, el error en el ajuste realizado según a1-MPPST es como promedio 4 veces mayor que el error en el ajuste según a2-MPPST.

Luego, el potencial ajustado determinado por a1-MPPST es excesivamente atractivo, por lo que no reproduce correctamente el comportamiento del potencial promediado

en el intervalo de $4.5 - 5.5 \text{ \AA}$. Por otra parte, el ajuste según a2-MPPST tampoco representa con exactitud dicho potencial, sin embargo, su perfil está mucho más cercano al mismo, lo

que implica una descripción más precisa de la realidad física del sistema. Los valores del coeficiente C_6 también muestran diferencias, al ser $51 \text{ eV} \times \text{\AA}^6$ el correspondiente a a2-MPPST.

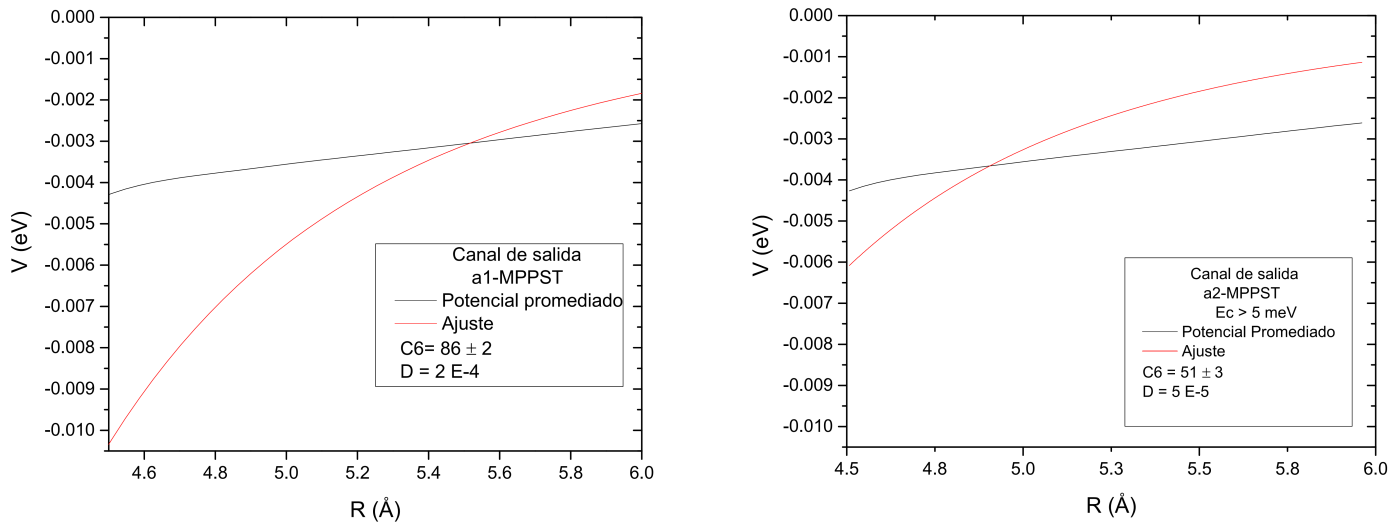


Figura 16. Comparación de los ajustes obtenidos mediante a1-MPPST (panel superior) y a2-MPPST (panel inferior) en la región de energías de colisión superiores a 5 meV del canal de salida.

REFERENCIAS

- [1] Langer, W. D. and Glassgold, A. E. *Astron. J.* **352**, 123 (1990).
- [2] Martin-Pintado, J., Bachiller, R., and Fuente, A. *A&A* **254**, 315 (1992).
- [3] Schilke, P., Walmsley, C. M., des Forêts, G. P., and Flower, D. R. *A&A* **293**, 321 (1997).
- [4] Larregaray, P., Bonnet, L., and Rayez, J. C. *J. Chem. Phys.* **127**(8), 084308 (2007).
- [5] Rivero-Santamaría, A. PhD thesis, Université Lille 1, InSTEC, (2013).
- [6] Rivero-Santamaría, A., Dayou, F., Rubayo-Soneira, J., and Monnerville, M. *Chem. Phys. Lett.* **610-611** 08 (2014).
- [7] Solomon, P. M. and Klemperer, W. *Astroph. J.* **178**, 389–422 (1972).
- [8] Turner, J. L. and Dalgarno, A. *Astroph. J.* **213**, 386–389 (1977).
- [9] Millar, T. J. *Ap. Space Sci.* **72**, 509–517 (1980).
- [10] McCarthy, M., Gottlieb, C., and Thaddeus, P. *Mol. Phys.* **101**(4-5), 697–704 (2003).
- [11] Wilson, R., Penzias, A., Jefferts, K., Kutner, M., and Thaddeus, P. *ApJ* **167**, L97 (1971).
- [12] Guillet, V., Jones, A. P., and P. des Forêts, G. *A&A* **497**(1), 145–153 (2009).
- [13] Gusdorf, A., Cabrit, S., Flower, D. R., and des Forêts, G. P. *A&A* **482**(3), 809–829 (2008).
- [14] López-Sepulcre, A., Walmsley, C., et al. *A&A* **526** (2011).
- [15] López-Sepulcre, A., Watanabe, Y., Sakai, N., Furuya, R., Saruwatari, O., and Yamamoto, S. *The Astrophysical Journal* **822**(2), 85 (2016).
- [16] Duarte-Cabral, A., Bontemps, S., Motte, F., et al. *A&A* **570** (2014).
- [17] Le Picard, S., Canosa, A., des Forêts, G. P., Rebrion-Rowe, C., and Rowe, B. *A&A* **372**(3), 1064–1070 (2001).
- [18] Gomez Martin, J. C., Blitz, M. A., and Plane, J. M. C. *Chem. Phys.* **11**, 671–678 (2009).
- [19] Larsson, B., Liseau, R., et al. *A&A* **466**(3), 999–1003 (2007).
- [20] Karska, A., Wampfler, S., et al. *A&A* **552** (2013).
- [21] Dayou, F., Larregaray, P., Bonnet, L., Rayez, J. C., Arenas, P., and González-Lezana, T. *J. Chem. Phys.* **128**, 174307 (2008).
- [22] Dayou, F. and Spielfiedel, A. *J. Chem. Phys.* **119**, 4237 (2003).
- [23] Mick, H. J. and Roth, P. *J. Phys. Chem.* **98**(20), 5310–5313 (1994).
- [24] Casavecchia, P. *Rep. Prog. Phys.* **63**(3), 355 (2000).
- [25] Dayou, F., Duflot, D., Rivero-Santamaría, A., and Monnerville, M. *J. Chem. Phys.* **139** (2013).
- [26] Daranlot, J., Jorfi, M., Xie, C., Bergeat, A., Costes, M., Caubet, P., Xie, D., Guo, H., Honvault, P., and Hickson, K. *Sci* **334**(6062), 1538–1541 (2011).
- [27] Bulut, N., Roncero, O., Jorfi, M., and Honvault, P. *J. Chem. Phys.* **135**(10), 104307 (2011).
- [28] Jorfi, M., Bussery-Honvault, B., Honvault, P., Stoecklin, T., Larregaray, P., and Halvick, P. *J. Phys. Chem. A* **114**(28), 7494–7499 (2010).
- [29] Jorfi, M. and Honvault, P. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13**, 8414–8421 (2011).
- [30] Jorfi, M., Honvault, P., Bargueño, P., González-Lezana, T., Larregaray, P., Bonnet, L., and Halvick, P. *J. Chem. Phys.* **130**, 184301 (2009).
- [31] Bussery-Honvault, B. and Dayou, F. *J. Phys. Chem.* , 113 (2009).

- [32] Pechukas, P. *Annu. Rev. Phys. Chem.* **32**(1), 159–177 (1981).
- [33] Light, J. C. *J. Chem. Phys.* **40**(11), 3221–3229 (1964).
- [34] Larregaray, P., Bonnet, L., and Rayez, J. C. *J. Phys. Chem. A* **110**(4), 1552–1560 (2006).
- [35] Langevin, P. *Ann. Chim. Phys.* **5**, 245 (1905).
- [36] Rivero-Santamaria, A., Gonzalez-Martinez, M. L., Gonzalez-Lezana, T., Rubayo-Soneira, J., Bonnet, L., and Larregaray, P. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13**, 8136–8139 (2011).
- [37] Levine, R. D. *Molecular Reaction Dynamics*. Cambridge University, (2005).
- [38] Dunham, J. L. *Phys. Rev.* **41**, 721–731 Sep (1932).
- [39] Bonnet, L. and Rayez, J. C. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **1**, 2383–2400 (1999).
- [40] Child, M. S. *Semiclassical Mechanics with Molecular Applications*. Clarendon Press: Oxford, (1991).
- [41] Nougier, J. P. *Methodes de Calcul Numerique*. Masson: Paris, (1983).
- [42] Zanchet, A., Halvick, P., Rayez, J. C., Bussery-Honvault, B., and Honvault, P. *J. Chem. Phys.* **126**, 184308 (2007).
- [43] Graff, M. and Wagner, A. *J. Chem. Phys.* **92**, 2423 (1990).
- [44] Chase, M., Curnutt, J., Downey, J., Valenzuela, E., et al. *J. Phys. Chem.* , 695 (1982).
- [45] Press, W. H., Teukolsky, S. A., and Vetterling, W. T. *NUMERICAL RECIPES: The Art of Scientific Computing. Third Edition*. Cambridge University Press, (2007).
- [46] Bonnet, L. and Rayez, J. C. *J. Chem. Phys.* **102** (1995).
- [47] Bonnet, L. and Rayez, J. C. *Chem. Phys.* **201**(1), 203–214 (1995).
- [48] Larregaray, P., Bonnet, L., and Rayez, J. C. *Journal of Chemical Physics* **114**(8), 3349–3364 (2000).
- [49] Álvarez, M., Guerra, A., and Lau, R. *Matemática Numérica*. Editorial Félix Varela. La Habana. Cuba, (2007).
- [50] Wakelam, V., Herbst, E., et al. *The Astrophysical Journal Supplement Series* **199**(1), 21 (2012).
- [51] Woodall, J., Agúndez, M., Markwick-Kemper, A., and Millar, T. *A&A* **466**, 1197–1204 (2007).
- [52] Siegel, A. and Schultz, A. *J. Chem. Phys.* **76**(9), 4513–4527 (1982).
- [53] Roach, A. *Chem. Phys. Lett.* **6**(4), 389 – 392 (1970).
- [54] Kalogerakis, K. S. and Zare, R. N. *J. Chem. Phys.* **104**(20), 7947–7964 (1996).

A SIMPLE SETUP TO OBTAIN FERROELECTRIC THIN FILMS BY DIP-COATING

UN SISTEMA EXPERIMENTAL SENCILLO PARA OBTENER CAPAS DELGADAS FERROELÉCTRICAS POR EL MÉTODO DE INMERSIÓN

C. E. MORENO CRESPO^a, A. PELÁIZ-BARRANCO^{a†}, A. SANTANA-GIL^a, Y. MENDEZ-GONZÁLEZ^a, J.D.S. GUERRA^b, Y. GONZÁLEZ-ABREU^a, P. SAINT-GRÉGOIRE^c, O. GARCÍA-ZALDÍVAR^a, F. CALDERÓN-PINAR^a

a) Facultad de Física-Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales, Universidad de La Habana. San Lázaro y L, Vedado. La Habana 10400, Cuba; pelaiz@fisica.uh.cu[†]

b) Grupo de Ferrolétricos e Materiais Multifuncionais, Instituto de Física, Universidade Federal de Uberlândia. 38408-100, Uberlândia – MG, Brazil.

c) MIPA laboratory, University of Nîmes, Nîmes Cedex 01 30021, France.

† corresponding author

Recibido 24/10/2016; Aceptado 24/11/2016

An easy, home-made experimental setup is presented to process ferroelectric thin films by using the dip-coating method. It has been used a stepper motor, a control circuit that provides electrical power to the motor, and a computer. A LabVIEW program has been developed to control all the process, including the velocities and times for the substrate's movement, which can be selected by the user. This setup allows the preparation of thin films under the same conditions than that of commercial equipment. Thin films from two systems have been obtained, $\text{Sr}_{0.70}\text{Ba}_{0.30}\text{Bi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ and $(\text{Pb}_{0.980}\text{La}_{0.020})(\text{Zr}_{0.950}\text{Ti}_{0.050})_{0.995}\text{O}_3$. The corresponding structural and ferroelectric characterizations validate the experimental setup.

Se presenta un sistema de obtención de capas delgadas ferroeléctricas, por el método de inmersión, desarrollado de forma sencilla y con muy bajo costo. Se utilizó un motor de paso, un circuito para controlar el motor que a la vez provee alimentación eléctrica, y una computadora. A través de un programa desarrollado en LabView se controla todo el proceso, y es posible seleccionar la velocidad y el tiempo para el movimiento del sustrato. El sistema experimental permite obtener capas con iguales condiciones que los equipos comerciales. Se obtuvieron capas de dos sistemas, $\text{Sr}_{0.70}\text{Ba}_{0.30}\text{Bi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ y $(\text{Pb}_{0.980}\text{La}_{0.020})(\text{Zr}_{0.950}\text{Ti}_{0.050})_{0.995}\text{O}_3$, cuya caracterización estructural y ferroeléctrica permitió validar el sistema desarrollado.

PACS: Deposition methods of Thin Films 81.15.-z, Computer interfaces 07.05.Wr, Ferroelectric materials, 77.84.-s, Antiferromagnetic materials, 75.50.Ee

I. INTRODUCTION

Ferroelectric systems have attracted much attention for many years as a result of their multiple applications in non-volatile random access memories, pyroelectric devices, piezoelectric transducers, etc. [1,2]. From this point of view, considerable attention receives the processing of ferroelectric thin films. Several techniques have been developed to obtain ferroelectric thin films [3]. By using physical methods, such as sputtering and laser ablation, the stoichiometry of the films cannot be guaranteed from the original targets [3]. In addition, such as methods involve expensive equipment. Therefore, it is more common to use chemical methods [3], such as sol-gel [3-7] and polymer precursor method [8], even when these techniques have some disadvantages. Nevertheless, the processing of high-quality ferroelectric thin films and the development of simple, low cost and reproducible methods to obtain them constitutes an open topic for the scientific community.

In the present work, a low-cost, home-made experimental setup is presented in order to obtain ferroelectric thin films by using dip-coating. This setup allows getting thin films under the same conditions as those of commercial equipment. Parameters as velocity of the

substrate in/out the solutions and time into the solutions are controlled by using a personal computer and LabVIEW as programming environment. Thin films from two systems were obtained, $\text{Sr}_{0.70}\text{Ba}_{0.30}\text{Bi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ (SBBN-30) and $(\text{Pb}_{0.980}\text{La}_{0.020})(\text{Zr}_{0.950}\text{Ti}_{0.050})_{0.995}\text{O}_3$ (PLZT 2/95/5), which were previously studied as ceramic bulks [9-11]. X-ray Diffraction (XRD), Scanning Electron Microscopy (SEM), Energy Dispersive Spectroscopy (EDS) and Polarization-Electric Field (hysteresis loops) experiments were carried out to evaluate the thin films.

II. EXPERIMENTAL SETUP (DIP-COATING)

The experimental setup to process thin films by dip-coating was designed by using a stepper motor, a circuit to control and give electrical power to the motor, and a computer to control the process by using a LabVIEW program. Figure 1 shows the details of the interconnections of the experimental system.

The stepper motors are able to convert a sequence of voltages into discrete angular movements. Then, they can be used in situations where a certain degree of precision is required. Floppy disk readers work by using a stepper motor, which guarantees the accurate movement of the head. These motors

are able to move one step at a time for each pulse that is applied.

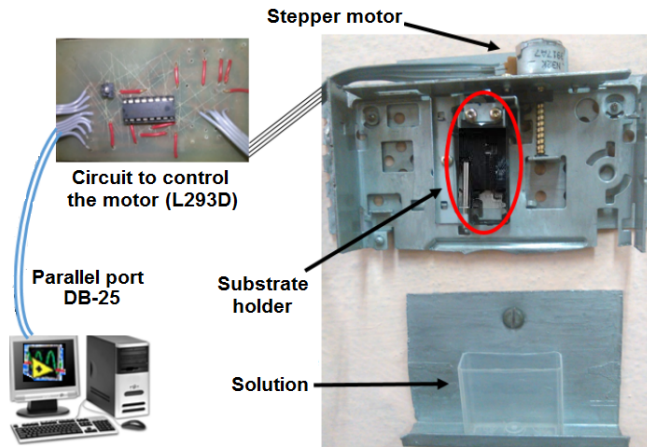


Figure 1. Experimental setup to obtain ferroelectric thin films by using the dip-coating method.

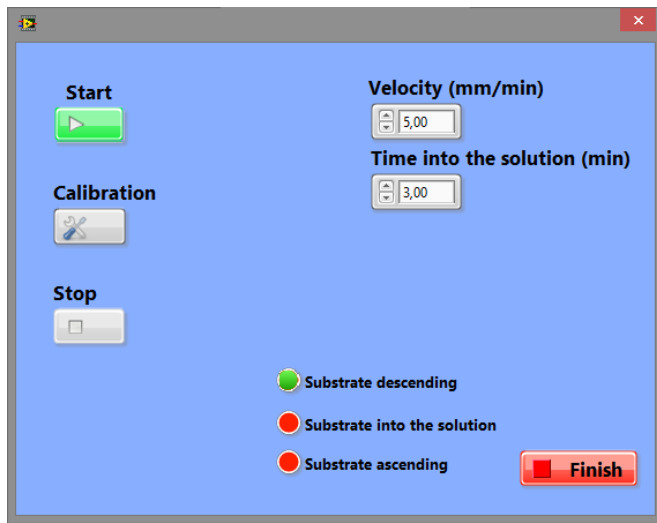


Figure 2. Frontal panel of the program, illustrating the downward motion step of the process.

The rotation's angle for each step [12] can range from 90^0 to 1.8^0 . For the proposed experimental setup, it has been used a stepper motor from a discarded floppy disk, a bipolar motor of 5 volts and 8 steps lap. The pulse sequence to control bipolar stepper motors is well known [12] and only the time between steps, the parameter that defines the speed of the motor, differs between specific applications. In the present experimental system, the motor is controlled by using a L293D integrated circuit through the parallel port of the computer [13]. A LabVIEW program was developed to control all the process, including the velocities and times for the substrate's movement, which can be selected by the user, offering different conditions to process thin films. Figure 2 shows the frontal panel of the program, where the user can calibrate the system, select the velocity for downward and upward motion of the substrate, and its time into the solution, and follows all the process through three control buttons (substrate descending, substrate into the solution, substrate ascending). The figure shows the case when the

substrate is descending (the corresponding control button is green).

III. THIN FILMS PROCESSING

Thin films were prepared by using a sol-gel process [4-7]. The solution containing the desirable ions was prepared from SBBN-30 ceramic powders, which were obtained by conventional mixed oxides method [9,10]. The stock solution was prepared by dissolution of the powders (0.5 g in acid solution [10% of nitric acid (HNO_3) and 90% of distilled water]). The dissolution was optimized by heating the solution up to around 80°C for 1 hour. Simultaneously, a resin was obtained by the Pechiney's method using citric acid and ethylene glycol (citric acid/ethylene glycol = 42/58 in mol %). The mixture was heated at 70°C for 1 hour, when transparent resin was obtained. After that, the resin and the stock solution were mixed at 90°C for 1 hour.

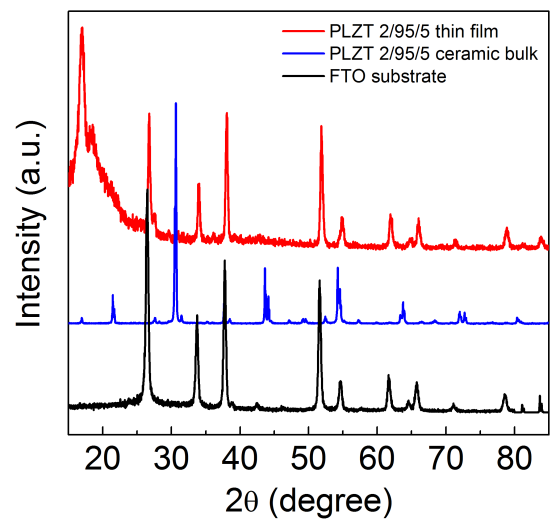
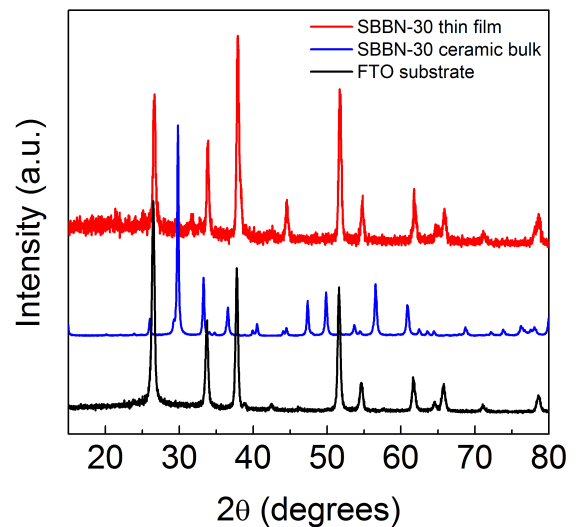


Figure 3. X-ray diffraction patterns, at room temperature, for (a) SBBN-30 and (b) PLZT 2/95/5 thin films. It has been included the corresponding results for ceramic bulk samples and the FTO substrate.

A similar way was used to prepare the solution from PLZT 2/95/5 ceramic powders, which were obtained by

conventional mixed oxides method too [11]. The stock solution was prepared by dissolution of the powders (0.2 g in acid solution [30% of nitric acid (HNO_3) and 70% of distilled water]). The dissolution was optimized by heating the solution up to around 80 °C for 1 hour. The resin was obtained using citric acid and ethylene glycol (citric acid/ethylene glycol = 44/56 in mol%). The mixture was heated at 90 °C for 1. Finally, the resin and the stock solution were mixture at 90 °C for 1 hour.

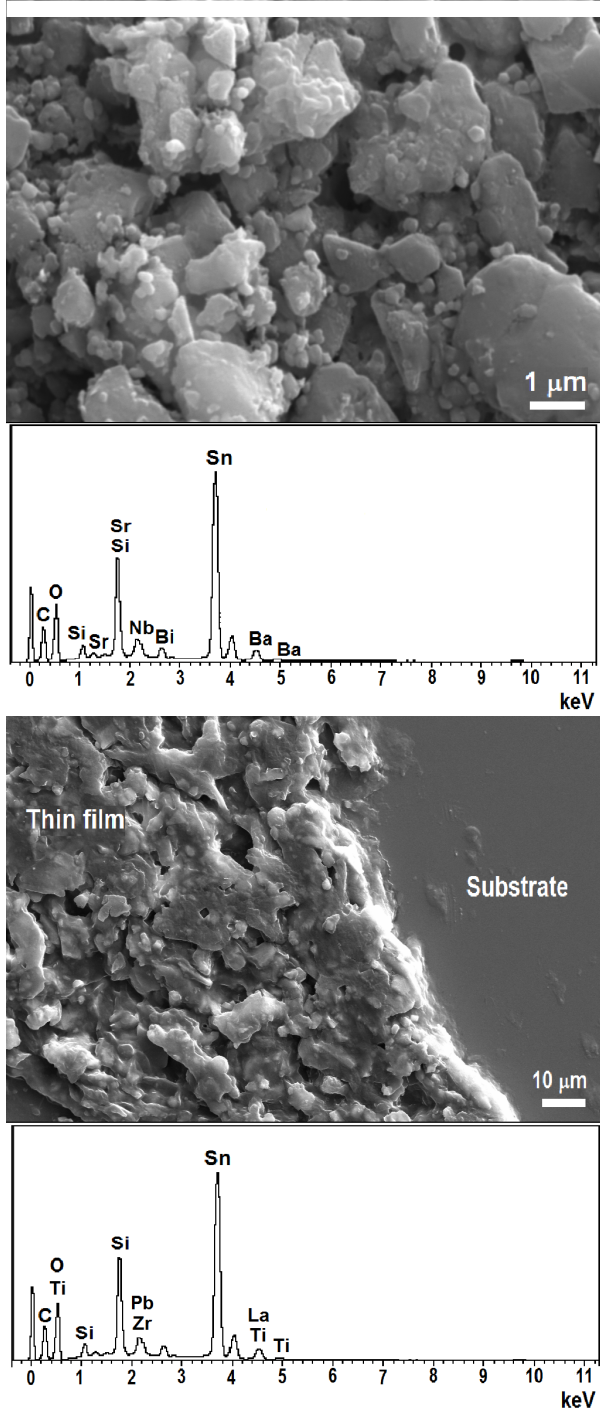


Figure 4. SEM micrographs and EDS spectra for (a) SBBN-30 and (b) PLZT 2/95/5 thin films.

Films from both solutions were deposited at room temperature on FTO substrates by using the experimental

setup, which was described in section II (dip-coating method). Finally, the deposited films were submitted to a heat treatment of 450 °C for crystallization. Deposited films were crack-free and looked uniform on the substrates.

IV. THIN FILMS CHARACTERIZATION

X-ray diffraction (XRD) measurements were performed, at room temperature, by using a Panalytical X'Pert Pro Multipurpose (MPD) diffractometer with $\text{CuK}\alpha_1$ radiation ($\lambda = 1.54056 \text{ \AA}$) and an incident angle of 1° . The data were collected in the angular range 20° to 60° in 2θ and a step of 0.02 degrees. Figure 3 shows the X-ray diffraction patterns, at room temperature, for the obtained thin films. The figures also include the results for the corresponding ceramic bulks, as well as the used FTO substrate. The results did not reveal any information concerning the films, i.e. the observed diffraction lines were almost exclusively associated to the FTO substrate, because of the area of the deposited films was smaller than that of the diameter of the beam. Note that it is not a limitation of the developed experimental setup. The deposition area is selected by the user considering the size of the used substrate.

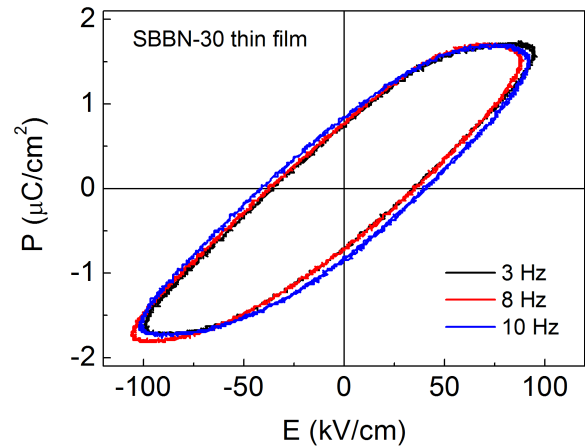


Figure 5. Hysteresis loops, at room temperature and several frequencies, for the SBBN-30 thin film.

Scanning Electron Microscopy (SEM) experiments were carried out on the thin films by using a Carl Zeiss Evo L5-15 microscope equipped with an X-ray energy dispersive spectrometer. Figure 4 shows the SEM micrographs and the energy dispersive spectroscopy (EDS) spectra for the processing thin films. Dense and uniform surfaces were observed and no micro-cracks or other microstructural defects were found. On the other hand, the EDS spectra have showed the presence of the corresponding elements for both studied systems. The spectra also included the elements, which correspond to the used FTO substrate (Sn and Si). These results validate the experimental setup for thin film preparation.

Finally, Polarization-Electric Field (P-E) dependences (hysteresis loops) were obtained by using a modified Sawyer-Tower circuit, which was previously developed by us [14]. Figure 5 shows the hysteresis loops, at room

temperature and several frequencies, for SBBN-30 thin film. Typical ferroelectric loops were obtained as expected considering the same measurements for the corresponding ceramic bulk [10]. Also a similar qualitative behavior to that of previous report in systems of the same Aurivillius family was obtained [15]. On the other hand, typical antiferroelectric loops were obtained for PLZT 2/95/5 thin film. Figure 6 shows the P-E dependence at 3 Hz, as an example of the obtained results at several frequencies. Previous structural analysis on the ceramic bulk sample has shown the coexistence of both antiferroelectric-orthorhombic (Pbam) and ferroelectric-rhombohedral (R3c) phases; the hysteresis loops have also shown a higher stability for the antiferroelectric phase [11]. The thicknesses of the thin films were estimated by using Atomic Force Microscopy (AFM) showing a value of 150 nm.

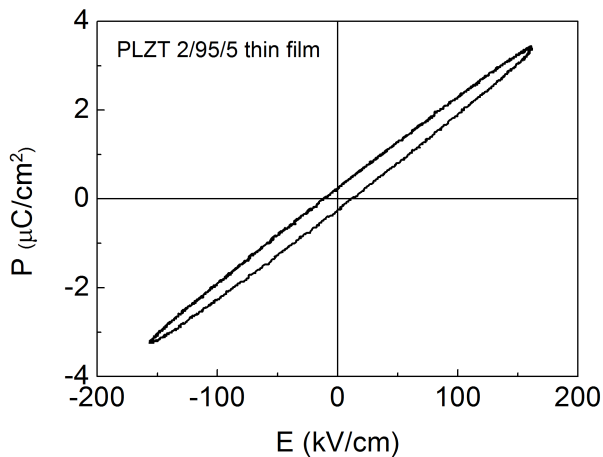


Figure 6. Hysteresis loops, at room temperature and 3 Hz, for the PLZT 2/95/5 thin film.

V. CONCLUSIONS

A low-cost, home-made experimental setup has been designed and constructed in order to obtain ferroelectric thin films by dip-coating method. It was designed by using a stepper motor, a circuit to control and provide electrical power to the motor, and a computer to control the process by using a LabVIEW program. The developed setup allows getting thin films under the same conditions than that of commercial equipment. The user can select the velocities and times for the substrate's movement, offering different conditions to process thin films. Thin films of $\text{Sr}_{0.70}\text{Ba}_{0.30}\text{Bi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ and $(\text{Pb}_{0.980}\text{La}_{0.020})(\text{Zr}_{0.950}\text{Ti}_{0.050})_{0.995}\text{O}_3$ were obtained and their structural and ferroelectric behavior was studied. Dense and uniform surfaces were observed and no micro-cracks or other microstructural defects were found. The EDS spectra showed the presence of the corresponding elements for both systems. Typical ferroelectric and antiferroelectric loops were obtained, respectively, as expected. These results validate the experimental setup, which has been developed to obtain ferroelectric thin films.

VI. ACKNOWLEDGMENTS

The authors would like to thank the Third World Academy of Sciences (RG/PHYS/LA 99-050, 02-225 and 05-043), and the ICTP, Trieste-Italy, for financial support of Latin-American Network of Ferroelectric Materials (NET-43). Thanks to CNPq and FAPEMIG Brazilian agencies for financial support. MSc. Mendez-González thanks to ICTP-CLAF for financial support of the PhD fellowship. Thanks to the Embassy of France in Havana, Cuba, for financial support for the scientific cooperation between the University of Nîmes and the Havana University. Special thanks to Grecia A. Gomez-Iniarte (Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF - Rio de Janeiro - Brazil) for the X-ray diffraction experiments.

REFERENCES

- [1] G. H. Haertling, *J. Amer. Cer. Soc.* 82, No. 4, 797 (1999).
- [2] K. M. Rabe, Ch. H. Ahn, Jeans-Marc Triscone, *Physics of Ferroelectrics* (Springer Berlin Heidelberg, New York, 2007).
- [3] Y. Garbovskiy, O. Zribi, A. Glushchenko, *Emerging applications of ferroelectric nanoparticles in materials technologies, biology and medicine in book Advanced in Ferroelectrics* (InTech, 2013).
- [4] K. K. Li, G. H. Haertling, W.-Y. Hwang, *Int. Ferroel.* 3, 81 (1993).
- [5] C. Brinker, G. Frye, A. Hurd, C. Ashley, *Thin Sol. Films.* 201, 97 (1991).
- [6] Y. Dimitriev, Y. Ivanova, R. Iordanova, *J. Univ. Chem. Tech. and Metall.* 43, 181 (2008).
- [7] E. Araújo, J. Eiras, *J. Eur. Cer. Soc.* 19, 1453 (1999).
- [8] F. M. Pontes, E. Longo, J. H. Rangel, M. I. Bernardi, E. R. Leite, J. A. Varela, *Mater. Lett.* 43, 249 (2000).
- [9] Y. González-Abreu, A. Peláiz-Barranco, J. D. S. Guerra, Y. Gagou, P. Saint-Grégoire, *J. Mat. Sci.* 49, 7437 (2014).
- [10] A. Peláiz Barranco, Y. González Abreu, J. D. S. Guerra, J. Wang, T. Yang, P. Saint-Grégoire, *Polarization and thermally stimulated processes in lead-free ferroelectric ceramics in book Ferroelectric materials - Synthesis and characterization* (InTech, 2015).
- [11] Y. Mendez-González, A. Peláiz-Barranco, A. Pentón-Madrigal, J. D. S. Guerra, G. Jie, W. Xiucui, T. Yang, *Rev. Cub. Fis.* 33, 12 (2016).
- [12] A. Hughes, B. Drury, *Electric motors and drives: fundamentals, types and applications* (Elsevier Ltd., Oxford, 2006).
- [13] T. Instruments. *Quadruple Half-H Drivers* (<http://www.datasheetcatalog.org/datasheet/texasinstruments/l293d.pdf>)
- [14] C. E. Moreno-Crespo, A. Peláiz-Barranco, Y. Mendez-González, A. Santana-Gil, F. Calderón-Piñar, Y. González-Abreu, *Rev. Cub. Fis.* 33, 59 (2016).
- [15] S. T. Zhang, B. Sun, B. Yang, Y. F. Chen, Z. G. Liu, N. B. Ming, *Mat. Lett.* 47, 334 (2001).

LIGHT TRANSPORT IN BIOLOGICAL TISSUES USING GPU

TRANSPORTE DE LUZ EN TEJIDOS BIOLÓGICOS UTILIZANDO PROCESADORES GRÁFICOS

N. LÓPEZ-MARÍN^{a†}, F. CORRALES-MACHÍN^b, E. CASTRO-ALVAREZ^c Y R. RODRÍGUEZ-FERNÁNDEZ^{a,c}

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

b) Instituto de Geofísica y Astronomía, La Habana, Cuba

c) Instituto de Nefrología, La Habana, Cuba

[†] corresponding author

Recibido 4/7/2016; Aceptado 10/11/2016

The exact solution of the propagation of light in turbid media is possible only in very simple problems. In almost all practical cases numerical methods are mandatory. In this paper we calculate the absorbance of light in tumoral tissue using Monte Carlo (MC) simulation in order to optimize the execution time of several parallel algorithms for Graphic Processing Units (GPU) and a serial code running on the Central Processing Unit (CPU) for 10^6 to 10^{10} photon packets. The plots of absorbance versus time and tissue depth are presented, showing that the precision of the methods depend on the number of photons and it is algorithm independent. The implementation of MC algorithms using GPU have shown that simulations may be 300 times faster than on a CPU providing an effective time framework to study complex systems.

La interacción de la luz con medios turbios complejos se estudia empleando métodos numéricos. En este trabajo presentamos un modelo para el cálculo de la absorbancia de la luz en tejido tumoral utilizando el método de Monte Carlo (MC) con el objetivo de optimizar los tiempos de ejecución de varios algoritmos paralelos ejecutados en unidades de procesamiento gráfico (GPU) y un código serie en la unidad central de procesamiento, variando el número de paquetes de fotones desde 10^6 hasta 10^{10} . Presentamos los gráficos de absorbancia en función del tiempo y la profundidad del tejido demostrando que la precisión del método aumenta con el número de fotones y es independiente del algoritmo utilizado. Demostramos que el uso de GPU puede aumentar la velocidad del método 300 veces, siendo una solución para estudiar este tipo de problemas.

PACS: Monte Carlo simulations 87.10.Rt, Light absorption and transmission 42.25.Bs, Photodynamic therapy, 87.50.wp

I. INTRODUCTION

Photodynamic therapy (PDT) is a minimally invasive therapeutic procedure used very often in the treatment of skin cancer [1]. It includes the uptake of a photosensitive compound in the tumor and the local activation of the drug by delivering a light dose at a specific wavelength onto the region of interest. In order to obtain a good outcome, accurate light dosimetry is critical during the treatment. Among other techniques for computing light dose, Monte Carlo (MC) methods are the most used in terms of accuracy and flexibility, been able to score multiple physical quantities simultaneously [2]. The Monte Carlo method is a statistical one, relying on the calculation of the propagation of a large number of photon packets. Consequently, it requires a large amount of computational time. Several techniques have been developed to speed up the simulation, among them the implementation of Monte Carlo algorithms using Graphic Processing Units [2].

In this paper we present a model for the propagation of light in a tumor in order to optimize the execution time of several algorithms running in the Graphic Processing Unit (GPU) and compare them with a serial algorithm running in the Central Processing Unit (CPU). In the first section we present the relevant theoretical aspects of light propagation in tissue and a description of the model we used. Then, we describe the implemented algorithms and the computer system used to execute them. Finally, we present the results of the absorption probability density matrix, the execution time optimization and the conclusions of our work.

II. LIGHT PROPAGATION IN TISSUES

The propagation of light in heterogeneous materials is determined by the Radiation Transport Equation (RTE) [3]. But, for almost all cases of practical interest, an analytic solution of the RTE is not possible and the use of approximate methods is mandatory. The simplest and most widely used approach is to replace the RTE with a diffusion equation for the fluence rate [4]. This approximation assumes that the radiance is isotropic and requires that the point of interest is far from the source of light and the boundaries of the system. Unfortunately, these assumptions are often unrealistic for PDT protocols because biological tissues scatters light not isotropically, mainly in the forward direction.

A general approach to solve the RTE with all its complexities is the Monte Carlo method [2]. An accurate description of the technique can be found in the literature [5–7]. Figure 1 shows a diagram of the algorithm used for the Monte Carlo method. In this model a photon packet with a given weight w , proportional to its energy, is launched into the tissue. At each time step, the packet moves with a step size defined by equation 1, where s is the step size, ξ is a random number uniformly distributed between 0 and 1, μ_a the absorption coefficient and μ_s the scattering coefficient.

$$s = -\frac{\ln(\xi)}{\mu_a + \mu_s} \quad (1)$$

At every interaction site, the weight of the packet w is reduced by Δw due to the tissue absorption (Equation 2). This value is

also accumulated in the absorption matrix at the grid point to record the amount of energy deposited at every interaction point.

$$\Delta w = w \frac{\mu_a}{\mu_a + \mu_s} \quad (2)$$

After being absorbed, the photon packet changes its direction due to the scattering process. The new direction is characterized by the azimuthal and deflection angles, Φ and Θ respectively. Φ is uniformly distributed between 0 and 2π . The probability distribution function of the cosine of the deflection angle is determined using the Henyey-Greenstein function [8], equation 3, where g is the anisotropy factor and equals $\langle \cos(\Theta) \rangle$.

$$P(\cos(\Theta)) = \frac{1}{2} \frac{1 - g^2}{(1 + g^2 - 2g \cos \Theta)^{3/2}} \quad (3)$$

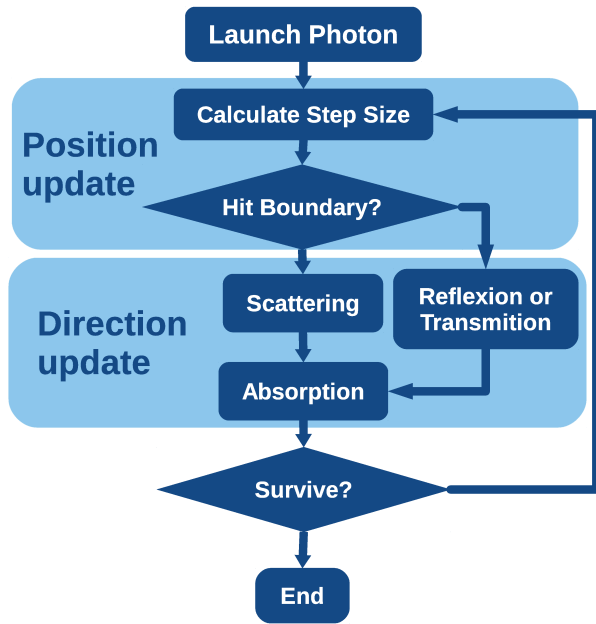


Figure 1. Diagram of the algorithm for Monte Carlo simulation of the light absorption in tumor tissue.

When the photon packet hit a boundary is either reflected or transmitted. The step size is reduced to the point in which it hits the boundary. We determine whether the photon is internally reflected or transmitted by calculating the internal reflectance, r , using Fresnel's formulas [9] and a random number uniformly distributed, ξ . If $\xi \leq r$, then the packet is internally reflected; if $\xi > r$, it is transmitted. The new directions are calculated by Snell's law in case of transmission and by reverting the directional cosine of the component perpendicular to the boundary in case of reflexion.

The process is repeated until the photon packet leaves the tissue or its weight fall below 90%. In the former case a Russian roulette gives the photon packet one chance out of ten of surviving with their weight multiplied by 10 in order to ensure energy conservation. When a sufficient number

of packets are launched, the cumulative distribution of all photon paths provide an accurate approximation to the true solution of the light transport problem.

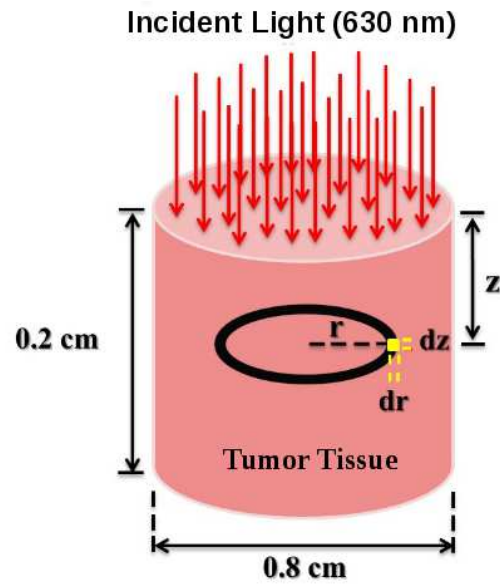


Figure 2. Representation of the tumor tissue layer with 0.2cm of depth and 0.4cm of radius, illuminated with a light beam at 630nm perpendicular to the surface.

In our model the tumor is simulated by a cylinder of 0.4 mm of radius and 0.2 mm of depth with optical parameters $\mu_a = 1.7 \text{ cm}^{-1}$, $\mu_s = 125 \text{ cm}^{-1}$, $g = 0.8$ and refractive index, $n = 1.37$, taken from ref. [10] for basal cell carcinoma at 630 nm. At this wavelength the penetration of light is deeper in biological tissues. During the simulation the absorption weight is scored in a two dimensional array in which each element $A[r, z]$ represents the cumulative photon weight in a ring of radius r , located at a depth z with thickness $dr = 0.0005 \text{ cm}$ and height $dz = 0.0005 \text{ cm}$. The absorbed photon probability density is calculated dividing the cumulative photon weight at each grid point by the number of photon packets and the volume of the region, in our case $\pi dr(2r + dr)dz$.

The tissue is illuminated with a light beam perpendicular to the surface. In order to simulate this process, the initial x and y coordinates of the photon packet are randomly generated in a circle of 0.4 cm of radius and the z coordinate is set to zero. Figure 2 shows a representation of the model. In our model, we do not consider refraction or reflexion because we have the same optical properties in all the tumor tissue.

III. ALGORITHMS IMPLEMENTATION

The main limitation of Monte Carlo method for obtaining a RTE numerical solution is the requirement of extensive computations. Fortunately, in the last few years several techniques have been developed to speed up and simplify the simulations [5, 11]. Graphic cards have evolved into multiprocessors with high computational power do to the heavy calculations needed for the high definition, real time 3D graphics. The development of nVidia GPU technology

and the CUDA (Compute Unified Device Architecture), an extension to the C programming language, made possible the spread of the use of graphic cards exclusively for calculations [12]. In the CUDA extension, the program routine written for running in the GPU and called by the serial part is named kernel. The GPU itself is composed of several Streaming Multiprocessors (SMP) each one containing many CUDA processing cores managed by a common control unit. The blocks running on the SMPs manage the parallel threads running on the CUDA cores.

The implementation of Monte Carlo algorithms using Graphic Processing Units (GPU), has shown that simulations may be many times faster than on a single standard Central Processing Unit (CPU) [13] providing an effective framework to study complex systems.

A serial program, written in ANSI C language, was made with the algorithm proposed in the previous section. We call it S02. In order to obtain the optimal parallel program we implemented several codes using the algorithms described in Figure 1. In all of them the Marsaglia XORWOW algorithm [14] was used to generate the uniformly distributed random numbers. MP^2 blocks and 512 threads were used, where MP represents the number of multiprocessors read in the programs from the graphic card. We wrote the absorption matrix using atomic operations to avoid a race condition if several threads attempt to write on the same memory address at the same time.

Table 1. Description of the implemented codes.

Code	Description
S02	Serial Code
A01	The kernel calculates one photon packet each time it is called. The iteration occurred in the CPU
A02	Each kernel is called only once calculating many photon packets. The iteration packets occurred in the kernel
A06	Single precision fast math operations of the CUDA core Arithmetic Logic Unit (ALU) is used
A09	Two graphic processors installed on the computer, fast math, intrinsic functions and pinned memory, allowing the GPU to manage the host address space.

Table 1 shows the main characteristics of each program code. On the A01 code, the kernel calculates only one photon packet at a time and the CPU code iterates until the total number of photon packets, N , are calculated. The iteration occurred in the CPU. On the A02 code, N is divided in such a way that each kernel is called only once calculating many photon packets. The iteration over multiple photon packets occurred in the kernel. A06 code is like A02, but using single precision fast math operations of the CUDA core Arithmetic Logic Unit (ALU). In A09 all possible optimizations for the GPU code are used: two graphic processors installed on the computer, fast math, intrinsic functions and pinned memory, allowing the GPU to manage the host address space.

All the programs were executed changing the amount of photon packets from 10^6 to 10^{10} . The simulations were

performed on a computer with 2 AMD Opteron processors of the 6800 series with 12 cores each, 128 GB of RAM memory, a hard disk array of 3 TB of capacity and 10000 rpm and 2 nVIDIA Tesla C2050 graphic cards with 448 processors and 4 GB of GDDR5 graphic memory.

IV. ABSORPTION PROBABILITY MATRIX

When two Monte Carlo simulations, using the same parameters are performed, there are differences in the results produced by the statistical variability of the stochastic method.

In order to show that all the programs are equivalent in terms of the results obtained, we compared the difference between two simulations running the same code and two different codes to show that the variability is the same.

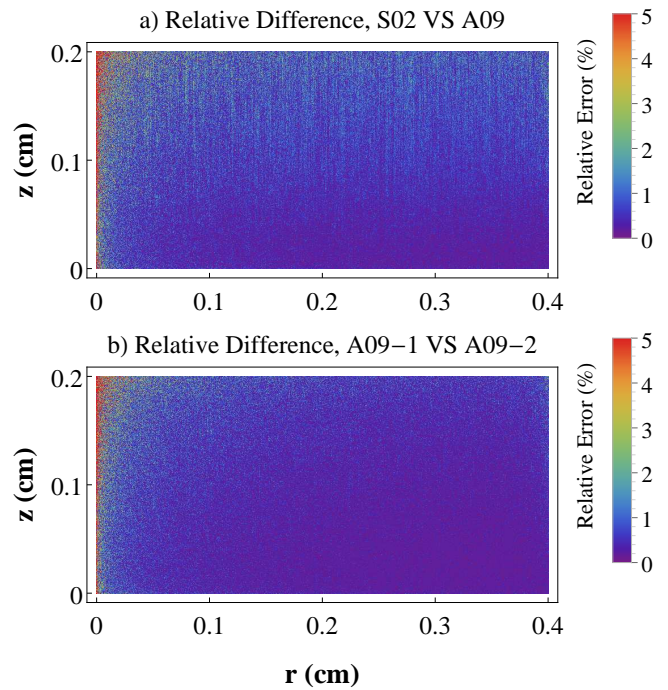


Figure 3. Relative difference in the absorption photon probability when comparing two simulations. (a) Relative difference between the simulation S02 and A09 using 10^9 photon packets. (b) Relative difference between two simulations with A09 using 10^9 photon packets. In both cases the difference is smaller than 5% demonstrating that the serial and parallel codes are equivalent in terms of results obtained.

The relative difference in absorption probability, E_{ij} , is calculated using equation 4. Where $A1_{ij}$ and $A2_{ij}$ represent the matrices we wanted to compare.

$$E_{ij} = \frac{|A1_{ij} - A2_{ij}|}{A1_{ij}} 100\% \quad (4)$$

Figure 3 shows the relative difference of the simulations S02 and A09 in (a) and two simulations using A09 in (b) using 10^9 photon packets. It can be seen that the relative difference in (a) is very similar to that in (b), suggesting that the results produced by A09 are statistically similar to that of S02, in both cases smaller than 5%. We calculated the relative differences between all the simulations obtaining equivalent results (data not shown).

Figure 4 represent the plot of the absorption probability density matrix and the corresponding contours for the simulations using the program A09 with 10^8 photon packets in (a) and 10^{10} in (b). The results are equivalent except for the noise, which is smaller when more photon packets are used. It can be noticed that the absorption probability decreases with depth. This behavior is caused due to the fact that photons are launched at the surface, the propagation of light in the tissue is in the forward direction (the anisotropy factor, $g = 0.8$) and photon packets lose weight as depth increases.

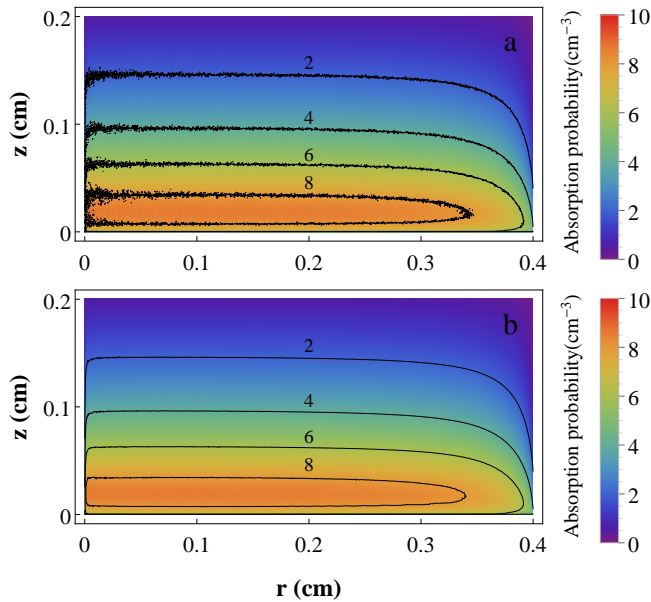


Figure 4. Absorption probability density matrices and the corresponding contours using the program A09. (a) Simulation with 10^8 photon packets. (b) Simulation with 10^{10} photon packets. Both results are equivalent except for the level of noise.

Figure 5 shows how the absorption probability density decreases with depth for two simulations with different number of photon packets. Near the surface the absorption increases with depth due to photon retrodispersion. At a depth of 0.02cm the absorption probability density reaches its maximum value and then decreases.

Figure 6 shows the plots of absorption probability density versus radius. Due to the geometry of the model, the absorption probability density is constant for a fixed value of tissue depth z , except in the borders, for radial values near 0.4cm .

Because we do not consider any photon packet outside the tumor tissue, near the borders, the absorbed photon packets arrive mainly from regions with values of radius smaller than the of the cylinder radius representing the tumor tissue. In order to obtain a uniform distribution the incident light source must be larger than this cylinder, but this imply that the number of photons per unit area is smaller and we will need more photon packets in order to obtain the same results.

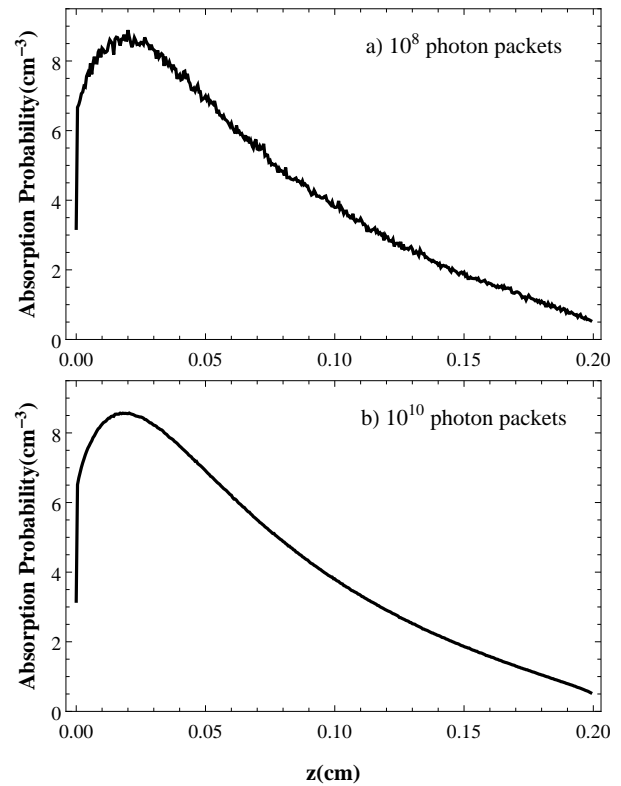


Figure 5. Plot of absorption probability density versus tissue depth for simulations with A09 program at $r = 0.05\text{cm}$. (a) Using 10^8 photon packets. (b) Using 10^{10} photon packets.

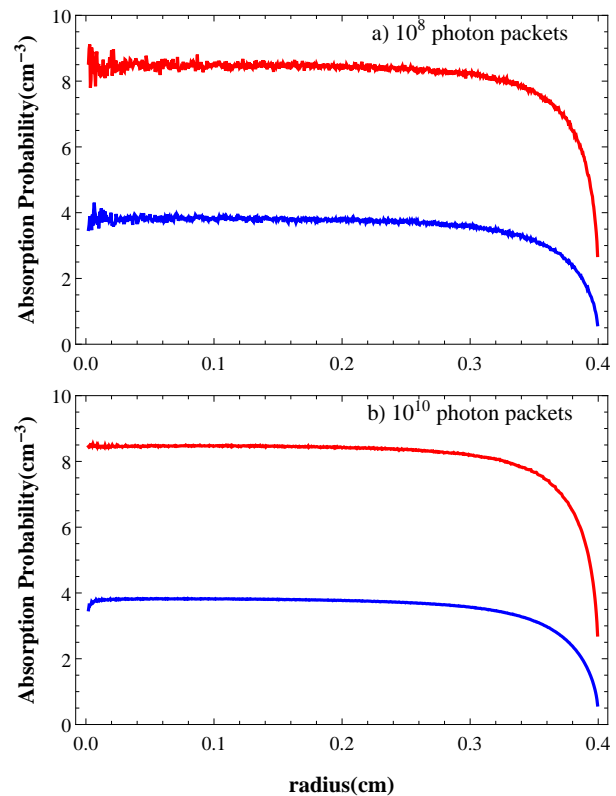


Figure 6. Plot of absorption probability density versus radius at tissue depth of 0.025cm in red and 0.1cm in blue using the A09 program. (a) For 10^8 photon packets. (b) For 10^{10} photon packets.

V. OPTIMIZATION OF THE EXECUTION TIME

We measured the execution time of every program in order to compare them and determine which one is the optimal. Figure 7 represent the logarithmic plot of the execution time versus the number of photon packets for each implemented code. It shows that the parallel programs are faster than the serial one. In particular A09 is 300 times faster than the serial code (68.9hours versus 14minutes with 10^{10} photon packets).

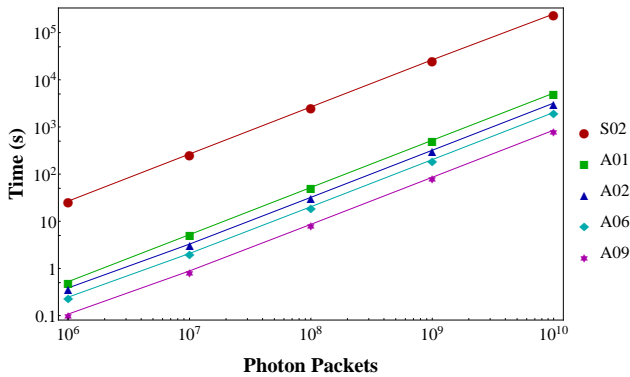


Figure 7. Logarithmic plot of the execution time versus the number of photon packets.

A visual inspection of the plots in figure 7 indicates that the relationship between time, t , and number of photon packets, N , is represented by equation 5. Where C is a constant and m the slope of the curve.

$$t = \frac{N^m}{C} \quad (5)$$

We fitted the data to equation 5 and the results for the calculation of the parameters m and C are shown in Table 2 for all the executed programs. Analyzing the results obtained for m , we can conclude that the relationship between t and N is linear and C is a constant representing the number of photon packets per second calculated by each program. The linear dependency also indicates that C do not depends on N .

Table 2. Parameters obtained after fitting the execution time versus the number of photon packets of each program to equation 5.

Code	m	C (s^{-1})
S02	0.972 ± 0.002	$(2.12 \pm 0.08) \times 10^4$
A01	1.00005 ± 0.00001	$(1.92088 \pm 0.00008) \times 10^6$
A02	0.9996 ± 0.0001	$(3.095 \pm 0.007) \times 10^6$
A06	0.9996 ± 0.0001	$(4.89 \pm 0.01) \times 10^6$
A09	0.9992 ± 0.0001	$(11.51 \pm 0.04) \times 10^6$

VI. CONCLUSIONS

In this work we presented a model to simulate the absorbance probability density function of a monolayer tumoral tissue

using the Monte Carlo Method. A serial and four parallel codes were implemented increasing the photon packet number from 10^6 to 10^{10} . We demonstrated that the use of GPU accelerated the execution time 300 times compared with the serial code in a linear way. It is more efficient to use two graphic cards, make the iteration cycles in the GPU and use the intrinsic functions of the ALU. This study corroborate the previous results about the behavior of absorbance probability density with tissue depth and tumor radius. Absorbance decreases with depth and is constant for the same values of radius except in the borders of the model. The Monte Carlo Method is efficient to study the interaction of light with turbid media but requires large execution times. The use of GPU calculation can effectively accelerate this process allowing to increase the number of photon packets obtaining more precise results.

REFERENCES

- [1] Allison, R. R. and Moghissi, K. *Photodiagnosis and Photodynamic Therapy* **10**(4), 331–341 (2013).
- [2] Zhu, C. and Liu, Q. *Journal of Biomedical Optics* **18**(5), 050902–050902 (2013).
- [3] Ishimaru, A. *Applied Optics* **28**(12), 2210 (1989).
- [4] Wilson, B. C. and Patterson, M. S. *Physics in Medicine and Biology* **53**(9), R61–109 (2008).
- [5] Prahl, S. A., Keijzer, M., Jacques, S. L., and Welch, A. J. *Dosimetry of laser radiation in medicine and biology* **5**, 102–111 (1989).
- [6] Wang, L., Jacques, S. L., and Zheng, L. *Computer Methods and Programs in Biomedicine* **47**(2), 131–146 (1995).
- [7] Jacques, S. L. and Wang, L. In *Optical-Thermal Response of Laser-Irradiated Tissue*, Welch, A. J. and Gemert, M. J. C. V., editors, Lasers, Photonics, and Electro-Optics, 73–100. Springer US (1995).
- [8] Henyey, L. and Greenstein, J. L. *Astrophys. J.* **93**, 70–83 (1941).
- [9] Hecht, E. *Optics*. (Addison-Wesley Publishing Company, Inc.), 3 edition, (1987).
- [10] Salomatina, E., Jiang, B., Novak, J., and Yaroslavsky, A. N. *J Biomed Opt* **11**(6), 064026 (2006).
- [11] Salas-García, I., Fanjul-Vélez, F., and Arce-Diego, J. L. *Optics Communications* **285**(6), 1581–1588 (2012).
- [12] Kirk, D. B. and Wen-meí, W. H. *Programming massively parallel processors: a hands-on approach*. Newnes, (2012).
- [13] Alerstam, E., Lo, W. C. Y., Han, T. D., Rose, J., Andersson-Engels, S., and Lilge, L. *Biomedical Optics Express* **1**(2), 658–675 (2010).
- [14] Marsaglia, G., Tsang, W. W., et al. *Journal of statistical software* **5**(8), 1–7 (2000).

“FLUX-FLOW” DE VÓRTICES DE ABRIKOSOV-JOSEPHSON EN CERÁMICAS SUPERCONDUCTORAS DE Bi-2223

FLUX-FLOW OF ABRIKOSOV-JOSEPHSON VORTICES IN Bi - 2223 SUPERCONDUCTING CERAMICS

J.R. FERNÁNDEZ-GAMBOA^a, A. CRUZ-GARCÍA^a, P. MUNÉ^{a†}, E. ALTSHULER^b, O. VÁZQUEZ-ROBAINA^b Y R. F. JARDIM^c

a) Facultad de Física, Universidad de Oriente; mune@uo.edu.cu[†]

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

c) Instituto de Física, Universidade de Sao Paulo, 05315-979, São Paulo, SP, Brazil

† autor para la correspondencia

Recibido 27/5/2016; Aceptado 9/11/2016

Se reporta un método para caracterizar el transporte eléctrico a través defectos intragranulares en dos direcciones principales de una muestra superconductora. Los datos experimentales fundamentales, las curvas de $I - V$, se tomaron en muestras de Bi-2223 a una temperatura de 90 K y campos magnéticos bajos ($H_a < 39.8$ kA/m), y se analizaron usando un modelo de “flux flow” propuesto por A. Gurevich [4]. El modelo permite determinar el primero y segundo campos críticos de las uniones Josephson largas debido a la presencia de defectos planares dentro de los granos. De los resultados obtenidos se aprecia cierta anisotropía en cuanto a las propiedades de transporte eléctrico y un aumento de los campos críticos asociados a las corrientes que pasan por los defectos planares para presiones de compactación crecientes.

We report a method for characterizing the electric transport through the intragranular defects in two main directions of a superconducting sample. The main experimental data, the $I - V$ curves, were taken on Bi-2223 samples at 90 K and low applied magnetic fields ($H_a < 39.8$ kA/m), and analyzed by using a flux flow model proposed by A. Gurevich. The model allows determining the lower and upper critical field of the large Josephson junctions due to the presence of planar defects inside the grains. The obtained results reveal certain anisotropy in the electric transport properties and an increase of the critical fields associated to currents through the planar defects with increasing compacting pressures.

PACS: Critical fields 74.25.Op, vortices 74.25.Ha, cuprate superconductors 74.72.-h

I. INTRODUCCIÓN

El descubrimiento y posterior estudio de los superconductores de alta temperatura crítica (SATs), han establecido la estructura granular típica de las muestras cerámicas, y, eventualmente, de algunos tipos de cintas superconductoras como una de sus principales limitaciones para las aplicaciones a gran escala de estos materiales [1,2]. La presencia de poros, grietas, fronteras de granos, fases extras e impurezas, es un hecho inevitable derivado de los procesos de obtención empleados, siendo las fronteras de granos uno de los factores más críticos. El mecanismo de transporte a través de las fronteras de granos (FGs) en los SATs ha atraído mucho la atención porque determina la capacidad de transportar altas corrientes sin disipación [1].

A diferencia de la mayoría de los materiales superconductores de baja temperatura crítica (SBTs), las FGs en los SATs son uniones débiles que presentan un comportamiento exponencial de su densidad de corriente crítica con el ángulo de orientación relativa entre los cristales que las componen de acuerdo con la expresión, $J_b = J_0 \exp^{-\vartheta/\vartheta_0}$ donde ϑ es ángulo de orientación relativa que al crecer a partir del ángulo crítico $\vartheta_0 = 2 \text{ deg} - 5 \text{ deg}$ [1] provoca una disminución de la densidad de corriente crítica a través de la FG. En la ecuación, J_b y J_0 representan las densidades de corriente críticas de la FG y el cristal, respectivamente.

La fuerte dependencia de $J_b(\vartheta)$ con ϑ y su alta anisotropía constituyen los elementos fundamentales que limitan el transporte eléctrico en policristales de SATs. Sin embargo, la extrema sensibilidad de $J_b(\vartheta)$ con ϑ en los SATs constituye una herramienta única para observar la transición fundamental entre los vórtices de Abrikosov (A) y los de Josephson (J). Con el incremento de ϑ se pueden observar tres tipos de vórtices en las FGs: i) vórtices (A) en las FGs para $\vartheta \ll \vartheta_0$ con un núcleo normal, ii) vórtices de Abrikosov Josephson (AJ) donde $\vartheta_0 < \vartheta < \vartheta_J$ y finalmente iii) los vórtices de Josephson (J) que corresponden a los valores de ángulos de orientación relativa entre los cristales que conforman la unión, no considerados en los intervalos ya mencionados. Estos tipos de vórtices están bien descritos en la literatura sobre el tema [3,4]. Generalmente el anclaje de los vórtices AJ y J es menor que el de los vórtices A, así que las FGs forman una red perlocativa natural para el movimiento de los primeros a través del superconductor [3]. Esa red perlocativa no es solamente una característica de las fronteras de granos. Existen defectos planares intragranulares que se comportan de forma similar a las FGs produciendo disipación por movimiento de vórtices de AJ [3,4].

De los compuestos SATs estudiados, uno de ellos es el $(\text{BiPb})_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10+y}$ conocido como Bi-2223. Las aplicaciones a gran escala de estos materiales requieren de su uso en forma policristalina en la confección de cables para transmisión de energía y limitadores de corriente, entre otros

usos [5,6].

El movimiento de los vórtices de Abrikosov en el estado mezclado de los superconductores de tipo II, constituye un mecanismo vinculado al transporte de corriente eléctrica que está bien estudiado en la literatura [7]. Sin embargo, el movimiento y modelación de los vórtices de AJ a través de las FGs o defectos planares ha sido menos estudiado y principalmente reportado para bicristales de $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ [8]. Recientemente, M. Hernández-Wolpez y colaboradores [9] han detectado la presencia de defectos planares por mediciones de transporte eléctrico y magnéticas en muestras de Bi-2223 obtenidas a baja presión de compactación y dopadas con Ca y Cu. Las mediciones fueron realizadas a 77 K y campos magnéticos de baja intensidad, $H_a < 39.8$ kA/m. Sin embargo, para muestras obtenidas a presiones de compactación superiores a 250 MPa, como las utilizadas por P. Muné y colaboradores [11], las curvas de “flujo atrapado” [10] no pueden detectar los defectos intragranulares porque las uniones débiles del material se fortalecen y pierden su capacidad de sensar el campo intergranular debido al flujo magnético atrapado en los defectos intragranulares.

En este artículo se propone un método para caracterizar el estado de “flux-flow” de vórtices de AJ en cerámicas superconductoras de Bi-2223. Las muestras fueron obtenidas a diferentes presiones de compactación y dopadas con Ca y Cu. El estudio se realizó a partir de curvas $I - V$ medidas utilizando el método de Montgomery [12] para campos magnéticos de baja intensidad, $H_a < 39.8$ kA/m. El uso de este método permitió realizar las mediciones en dos direcciones principales de la muestra. A partir de las curvas $I - V$ obtenidas para diferentes valores de intensidad de campo magnético aplicado y a una temperatura de 90 K se construyeron las curvas de resistividad versus intensidad del campo magnético, las cuales se ajustaron siguiendo el modelo de “flux-flow” para vórtices de AJ propuesto por A. Gurevich [8]. Tal procedimiento permitió estimar el primero y segundo campos críticos de los defectos planares y las longitudes características medias de los vórtices de AJ en las dos direcciones principales de las muestras obtenidas a presiones de compactación mayores de 500 MPa. De acuerdo al conocimiento de los autores es la primera vez que un estudio de este tipo se presenta en muestras policristalinas de Bi-2223.

II. PARTE EXPERIMENTAL

Las composición de partida de las muestras empleadas para las mediciones, se puede representar mediante la fórmula estequiométrica general $\text{Bi}_{1.65}\text{Pb}_{0.35}\text{Sr}_2\text{Ca}_{2+x}\text{Cu}_{3+x}\text{O}_y$, donde x representa el exceso de Ca y Cu añadido que en este caso fue de $x = 0.2$. Para su preparación primeramente se mezclaron en la proporción necesaria los compuestos de partida: Bi_2O_3 , PbO_2 , SrCO_3 , CaCO_3 y CuO . Esta mezcla fue tratada térmicamente a 750 °C por 40 h para su calcinación. El material resultante fue molido durante 15 min, compactado a 222.4 MPa y calcinado nuevamente a 800 °C durante 40 h. Para la sinterización se realizó el procedimiento anterior tres veces por 40 h cada uno pero a la temperatura de 830

°C. Finalmente las pastillas se molieron por última vez y se compactaron a diferentes presiones. Estos pasos fueron seguidos de una última síntesis a la temperatura antes mencionada durante otras 40 h. Las muestras se denominan 62 y 82 y se obtuvieron a las presiones de compactación de 585.19 y 780.25 MPa, respectivamente.

Durante el proceso de elaboración, la obtención de la fase Bi-2223 se observó mediante la realización de difracción de rayos-X en muestras de polvo. Para esto se empleó un difractómetro Shimadzu XRD-6000 con radiación $K\alpha$ de Cu, con un monocromador de grafito y filtro de Ni.

El tamaño de los granos y los ángulos entre los granos adyacentes se estimaron a partir de micrografías obtenidas por microscopía electrónica de barrido (MEB) en muestras que fueron previamente fracturadas. Con este objetivo se utilizó un microscopio electrónico de barrido Hitachi modelo S-530 con una resolución nominal de $\approx 30 - 40$ nm operando en un rango de 15 a 20 kV. A través de este procedimiento se puede evaluar de forma cualitativa la porosidad de las muestras para diferentes valores de presiones de compactación, así como los cambios en el estado de orientación de los granos. También se determinó, mediante la confección de un histograma, la función de distribución de los ángulos de orientación relativa entre las cristalitas considerando que la dirección de los ejes cristalográficos se pueden determinar a partir de la forma característica de escamas propia de los granos de este compuesto superconductor. Para ello se trazó una recta en cada uno de dos granos adyacentes sobre la parte de mayor área de la cristalita que debe coincidir con el plano ab de la misma (ver Figura 3). Usando el programa ImageJ se determinó el ángulo entre ambas rectas y se construyó un histograma para cada muestra a partir del cual es posible determinar el valor medio del ángulo entre los planos ab las cristalitas.

La naturaleza cuasi-bidimensional de la superconductividad del Bi-2223 es la causa de una marcada anisotropía en las propiedades de transporte de los monocristales superconductores de este compuesto, pues las “supercorrientes” son mayores a lo largo de los planos Cu-O que en la dirección perpendicular a ellos [13] por lo que debe esperarse que en cerámicas superconductoras de Bi-2223 exista anisotropía en cuanto a las propiedades de transporte a nivel de muestra si esta presenta algún grado de orientación de sus cristalitas, resultado del proceso de elaboración que incluye varias síntesis y prensados como fue previamente descrito [14]. La teoría del medio efectivo modela un material heterogéneo y anisótropo, que es el caso general de los superconductores cerámicos, como uno homogéneo y anisótropo. Esto justifica la aplicación del método de medición de Montgomery [12, 15] a las muestras estudiadas en el presente trabajo.

El método de medición de Montgomery, permite obtener las componentes del tensor resistividad eléctrica de una muestra anisótropa. La relación entre las resistencias de dos direcciones del sólido anisótropo en forma de paralelepípedo es utilizada de manera aproximada para determinar la

correspondiente relación de las longitudes en dos direcciones de una muestra isotrópica equivalente [12], entendiéndose por muestra isotrópica equivalente aquella que tiene igual resistencia eléctrica pero diferentes dimensiones que el compuesto anisótropo real, cumpliendo además con la relación $\rho^3 = \rho_x \rho_y \rho_z$, donde ρ es la resistividad del paralelepípedo isotrópico equivalente, mientras ρ_x , ρ_y y ρ_z son las resistividades del anisótropo real en las direcciones perpendiculares x , y y z , respectivamente [12] (ver Figura 1).

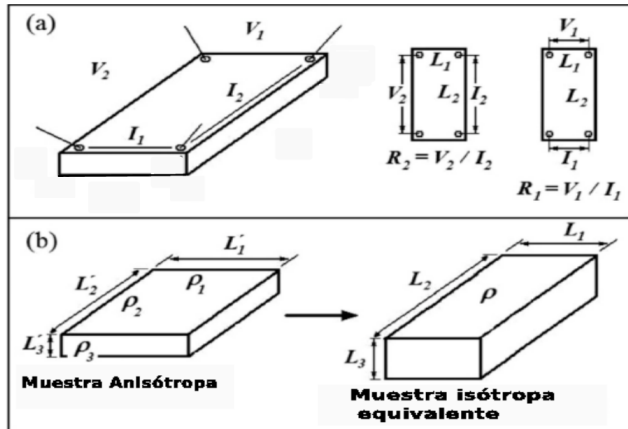


Figura 1. a) Configuración de contactos para el uso del método de Montgomery. V_1 y V_2 son los voltajes medidos debido a la aplicación de las corrientes I_1 e I_2 . b) Representación de las relaciones de transformación de Wasscher's [16] de una muestra anisótropa y su isotrópica equivalente. Figura tomada y modificada de la referencia [15]

Para calcular las resistividades ρ_1 y ρ_2 correspondientes a las componentes del tensor resistividad eléctrica de la muestra anisótropa real que está sometida a mediciones de transporte eléctrico, se utilizan las siguientes ecuaciones [12, 15]:

$$\rho_1 = \frac{\pi}{8} E' \frac{L'_2 L_1}{L'_1 L_2} R_1 \sinh\left(\pi \frac{L_2}{L_1}\right) = \frac{\pi}{8} E' \frac{L'_2 L_1}{L'_1 L_2} R_2 \sinh\left(\pi \frac{L_1}{L_2}\right) \quad (1)$$

$$\rho_2 = \frac{\pi}{8} E' \frac{L'_1 L_2}{L'_2 L_1} R_1 \sinh\left(\pi \frac{L_2}{L_1}\right) = \frac{\pi}{8} E' \frac{L'_1 L_2}{L'_2 L_1} R_2 \sinh\left(\pi \frac{L_1}{L_2}\right) \quad (2)$$

donde E' es el espesor efectivo de la muestra que para $L'_3 \ll \sqrt{L'_1 L'_2}$ puede considerarse igual a L'_3 .

Las muestras fueron obtenidas en forma de cilindro. Por eso, para la aplicación del método de medición de Montgomery, se necesitó que fueran cortadas en forma de paralelepípedo regular (ver Figura 2).

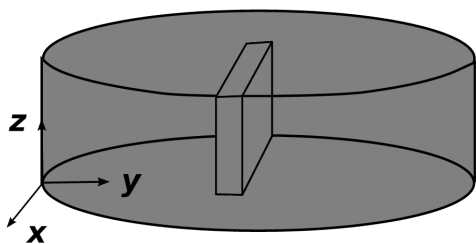


Figura 2. Forma de paralelepípedo en que se cortan las muestras para realizar la medición a partir de la pastilla que tiene forma cilíndrica.

Posteriormente se colocaron cuatro contactos eléctricos puntiformes en los vértices de una de las caras de mayores dimensiones del paralelepípedo en cuestión, se fijó una configuración, se inyectó diferentes valores de intensidad de corriente eléctrica a través de los dos extremos escogidos para este fin y se midió la respuesta de voltaje por los otros dos. Después se rotó la configuración de contactos en 90° y se repitió el procedimiento anterior (ver Figura 1a). En todos los casos el vector intensidad del campo magnético aplicado se dirigió perpendicularmente a la dirección en que se inyectó la corriente eléctrica. Finalmente, usando las expresiones 1 y 2, se pudo calcular las componentes del tensor resistividad eléctrica correspondientes a las direcciones x y z que están sobre la cara del paralelepípedo seleccionada para colocar los contactos y son perpendiculares entre sí.

El sistema de medición está compuesto por un controlador de temperatura LakeShore modelo 330 con el cual se estabiliza la temperatura de la muestra a 90 K. Para excitar la muestra se empleó una fuente de corriente Philips PE 1540 en un rango de intensidad de corriente eléctrica entre 0 y 2,5 A. El sistema se conectó a un preamplificador de bajo ruido de la Stanford Research Systems modelo SR560 que va conectado a su vez con una tarjeta de adquisición de datos de la National Instruments modelo BNC-2090, sistema que se utiliza para la medición de la respuesta de voltaje del sistema. La recepción y guardado de los datos se realizó a través de una computadora personal. Se realizan dos mediciones de $I - V$ para cada configuración, la primera se hace inyectando la corriente eléctrica en sentido positivo y la otra en el sentido negativo. Esto se hace para contrarrestar los cambios de valores de voltaje que se deban a la presencia de fuerzas electromotrices de naturaleza termoeléctrica. A partir de las curvas $I - V$ se construyen las curvas de ρ versus J para diferentes valores de intensidad del campo magnético aplicado, H_a , y las resistividades de "flux-flow" ρ_{ff} como función de H_a . El campo magnético se aplicó mediante un electroimán con núcleo de aire que permite someter la muestra a intensidades de campo magnético de hasta 39.8 kA/m con variaciones inferiores a un 5% en los 3 cm centrales de la bobina, según su dirección axial. Como las muestras utilizadas son milimétricas entonces la intensidad del campo magnético aplicado se puede considerar uniforme al menos en un 95%. De las curvas $I - V$ obtenidas por el método de Montgomery para diferentes valores del intensidad de campo magnético se pudo obtener también las curvas de densidad de corriente crítica media en función de la intensidad del campo magnético en las dos direcciones principales de la muestra (curvas vírgenes). En este caso se tomo como criterio para determinar la densidad de corriente crítica el de una intensidad de campo eléctrico medio en la muestra de $1 \mu V/cm$.

III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La composición de fase obtenida a través de los difractogramas muestra que la fase (BiPb)-2212 se encuentra en 11.05 % Vol mientras la fase Ca_2PbO_4 está presente de un 0.23 % Vol. El porcentaje de pureza en (BiPb)- 2223 es superior

al 88.72 % Vol que para los estudios previstos en el marco de este trabajo se considera aceptable.

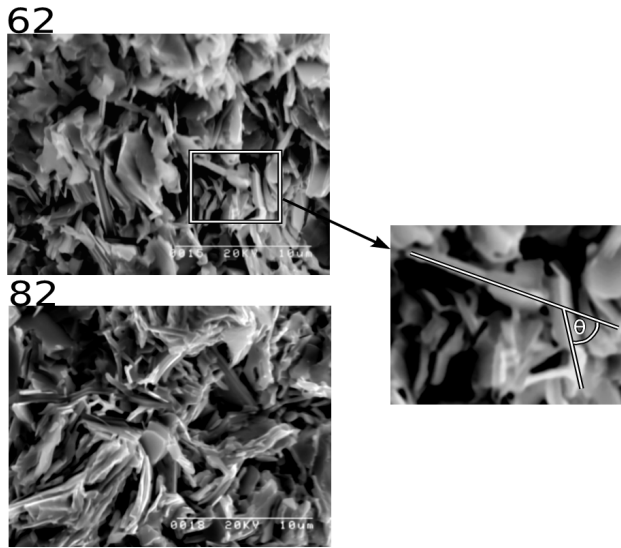


Figura 3. Micrografías de MEB de pastillas fracturadas correspondientes a las muestras 62 y 82, respectivamente. El procedimiento para estimar el ángulo de desalineación entre los planos ab se muestra magnificado.

En la Figura 3 se muestran dos micrografías que representan las superficies fracturadas de las muestras 62 y 82, respectivamente. En ellas es posible observar que la morfología de los granos de manera general es muy similar, la cual está caracterizada por tener forma de escamas. Un análisis cuidadoso de estas micrografías revela cambios en la homogeneidad de las muestras, fundamentalmente asociados con una reducción de la porosidad debido al aumento de la presión de compactación. La forma de escamas de las cristalitas permitió determinar la relación $a/c \approx 10$ que representa la anisotropía de forma de los granos cuyo tamaño medio en el plano ab resultó ser de $\sim 4 \mu m$. Además, se midieron los ángulos entre los planos ab de las cristalitas con el programa ImageJ obteniéndose que el valor medio en ambas muestras estudiadas es mayor que 40° . Veamos qué significa tal valor de ángulo respecto a la distribución de los diferentes tipos de vórtices en las muestras 62 y 82. Los núcleos de los vórtices de AJ son descritos por las ecuaciones de la electrodinámica no-local de las uniones Josephson (ENJ) [3, 8], en la región de parámetros donde $J_b > J_0 \frac{\xi}{\lambda}$ y $\theta(x) = \varphi_1 - \varphi_2$ (diferencia de fase) varía en la escala $l = \lambda \frac{\xi}{\lambda} \approx \xi \frac{l_b}{\lambda}$ mucho más pequeña que λ pero mayor que ξ , si $J_b > \frac{l_0}{k}$, donde $k = \frac{\lambda}{\xi} \approx 10^2$ [3]. Cuando ϑ se incrementa la longitud del núcleo $l(\vartheta) \approx \xi \frac{l_b}{\lambda}$ incrementa. Los vórtices AJ se vuelven J para ángulos $\vartheta > \vartheta_J \approx \vartheta_0 \ln k$, aquí $l(\vartheta)$ excede λ . Si se toma $\vartheta = 5^\circ$ [1], los vórtices de AJ determinan el comportamiento en las FG con $\vartheta_0 < \vartheta < \vartheta_J \approx 23^\circ$. Entonces se puede concluir que los vórtices entre los granos son de tipo J. Luego, la existencia de los vórtices de AJ puede ser debida a los defectos planares dentro de los granos, lo cual concuerda con reportes recientes [9, 11]. Los resultados presentados aquí se obtuvieron en muestras compactadas a una mayor presión que las reportadas en la referencia anterior, lo que presupone un fortalecimiento de las uniones

intergranulares. Sin embargo, no debe perderse de vista que en nuestro caso la temperatura de medición supera en 12 K a la reportada anteriormente, lo que pudiera compensar el efecto de la mayor compactación.

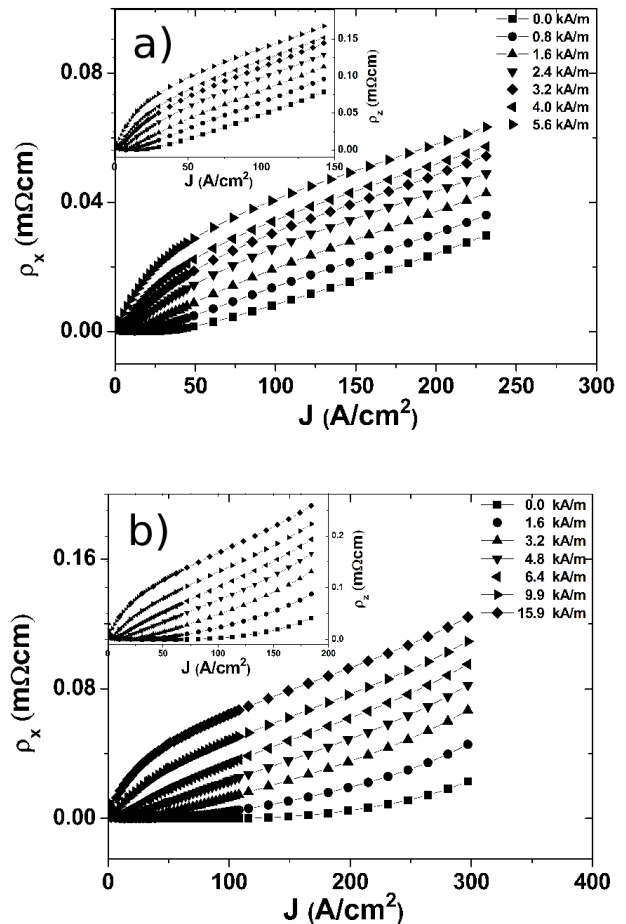


Figura 4. a) Curvas de $\rho - J$ de la muestra 62 en las direcciones x y z (insertada). b) Curvas de $\rho - J$ de la muestra 82 en las direcciones x y z (insertada).

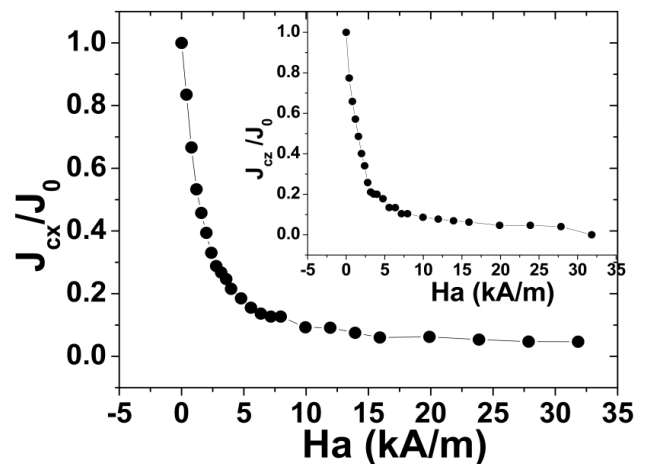


Figura 5. Dependencia de la densidad de corriente crítica contra la intensidad del campo magnético aplicado en las direcciones x y z (insertada) de la muestra 62.

Las curvas $I - V$ medidas a diferentes valores de intensidad del campo magnético aplicado perpendicularmente a la

corriente que se le hizo pasar a las muestras fueron transformadas a curvas de $\rho - J$ para las direcciones de x y z utilizando las ecuaciones 1 y 2 respectivamente (ver Figura 4). Aquí J representa el valor medio de la densidad de corriente en la muestra.

Como se observa en la Figura 4 a medida que aumenta la intensidad del campo magnético aplicado, H_a , la forma inicial de la curva cambia. Este cambio de comportamiento, que se manifiesta en un cambio de concavidad de las curvas, podría deberse a que el flujo penetra en los defectos planares de los granos de Bi-2223, que son fronteras de bajo ángulo, en forma de vórtices de AJ. Esto provoca que se active un nuevo mecanismo de disipación, que se superpone al ya existente intergranular, modificando la forma de la curva. Además en el caso específico de la muestra 82 donde la densidad de corriente de excitación alcanza valores cercanos a 300 A/cm^2 se puede observar que a partir 200 A/cm^2 hay una clara pérdida de la cuasilinealidad de las curvas con tendencia a incrementar la pendiente lo cual podría estar relacionado con un incipiente paso al estado de disipación por "flux-flow" de las regiones intragranulares libres de defectos.

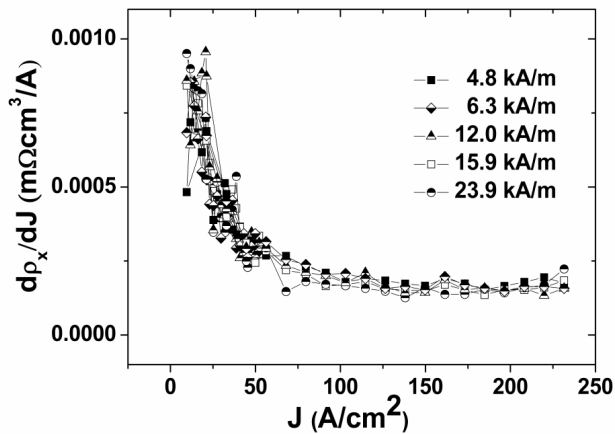


Figura 6. Derivadas de las curvas de $\rho - J$ de la dirección x de la muestra 62.

En las curvas vírgenes de la muestra 62 que se presenta como ejemplo, se puede observar que aproximadamente para $H_a = 2,8 \text{ kA/m}$ hay un cambio en la pendiente de la curva (ver Figura 5) lo que podría estar ligado a un cambio en las características del mecanismo de disipación predominante. Siguiendo las ideas anteriores, el primer campo crítico de los defectos planares, H_{c1p} , que aparece en la tabla 1, debe representar la intensidad de campo magnético a partir de la cual se comienza a observar la disipación intragranular del material. En este caso la estimación se hizo a partir del cambio de concavidad de las curvas de $\rho - J$ en la zona de baja densidad de corriente de excitación. Aunque solo se representan algunas mediciones, debe aclararse que las curvas $\rho - J$ se midieron para diferentes valores de intensidad de campo magnético aplicado con un paso variable entre $0.4 - 4.0 \text{ kA/m}$ y un valor máximo de 31.8 kA/m . El valor de H_{c1p} se puede obtener también mediante mediciones de flujo atrapado [9] pero este método tiene la limitación, ya mencionada, de que solo funciona para muestras obtenidas a baja presión de compactación si la temperatura de medición

es 77 K . Una mejor comparación de la efectividad de estos métodos para la determinación de H_{c1p} requiere de un estudio simultáneo aplicándolos para diferentes temperaturas en muestras obtenidas a diferentes presiones de compactación.

Si se halla la derivada de las curvas de $\rho - J$ para valores de $H_a > H_{c1p}$ como se muestra en la Figura 6 se puede observar que para cierto valor de densidad de corriente de excitación estas tienen un comportamiento muy similar, esto se debe a que la fuerza de Lorentz supera la fuerza de anclaje de los vórtices de AJ y el material entra al estado de "flux-flow" que suponemos sea de los vórtices de AJ.

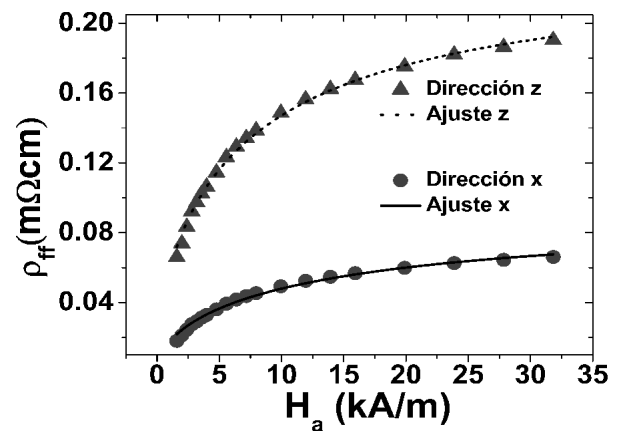


Figura 7. Resistividad del estado de "flux-flow" de los vórtices de AJ en función de la intensidad del campo magnético aplicado y su ajuste al modelo (3) para las dos direcciones de la muestra 62.

En aras de verificar esta hipótesis, se ha tomado el valor de resistividad para el cual el material entra en el supuesto estado de "flux-flow" de AJ y se ha graficado en función de su correspondiente intensidad de campo magnético aplicado como se muestra en la Figura 7. El menor valor de densidad de corriente eléctrica aplicada para el cual se considera que la derivada de las curvas de resistividad es la misma para todos los valores de intensidad de campo magnético aplicado se determina mediante un programa de cómputo asumiendo una diferencia relativa entre ellas sea menor que 0.1. Esto se hace porque valores mayores de la densidad de corriente eléctrica aplicada podrían deformar los vórtices de AJ estudiados. Posteriormente, los datos experimentales se ajustaron al modelo propuesto por A. Gurevich [4], en el cual la resistividad eléctrica debida a la viscosidad del movimiento de los tubos de flujo de AJ en función de la intensidad del campo magnético aplicado satisface la ecuación:

$$\rho = \rho_l + \frac{\rho_n \sqrt{H_a}}{\sqrt{H_0 + H_a}}, \quad H_0 = \frac{\phi_0}{2\pi l^2}. \quad (3)$$

Aquí ρ_n es la resistividad del estado normal de las uniones de bajo ángulo y H_0 es su segundo campo crítico [4]. Hemos agregado un sumando, $\rho - J$, ya que estamos en presencia de un material granular donde además de los defectos planares se encuentra la resistividad propia de las uniones entre los granos. Tal resistividad se obtiene de la curva $\rho - J$ para intensidad de campo magnético aplicado cero a una densidad de corriente igual a la determinada mediante la Figura 6. Los

valores de $\rho - J$ para cada muestra aparecen en la tabla 1. Con esta aproximación todos los efectos del campo sobre la resistividad de la muestra, ρ , se han considerado incluido en el segundo término.

Del ajuste de los datos experimentales con la ecuación 3 se obtienen los valores de ρ_n , H_0 y l que aparecen en la tabla 1. Para todo los casos $l < \lambda_e = \lambda_0 / (\sqrt{1 - T/T_0}) = 3674 \text{ \AA}$ y $l > \xi = \xi_0 / \sqrt{1 - T/T_0} = 37 \text{ \AA}$ para una temperatura de 90 K, $\lambda = 1500 \text{ \AA}$ y $\xi_0 = 15 \text{ \AA}$ [4]. Aquí, λ_e representa la estimación a 90 K de λ_{ab} para el caso de un monocristal de Bi-2223 pero sin estar dopado con Cu, Pb y Ca como ocurre en nuestro caso.

El modelo ajusta los datos experimentales con un coeficiente de determinación (R^2) superior a 0.99 en ambas muestras para las dos direcciones principales. Este coeficiente expresa la calidad del modelo para reproducir los datos experimentales. Como resultado se obtienen valores de la longitud característica, $l \ll \lambda$ con errores relativos menores que el 10%. Por otro lado, si se incluyen valores de intensidad de campo menores que H_{c1p} entonces los errores relativos pueden ser superiores al 50% en dependencia de la cantidad de puntos que se incluyan. Esto evidencia que para campos menores que H_{c1p} el mecanismo de disipación es diferente. La influencia del tamaño de los contactos también fue considerada en las incertidumbres de las mediciones realizadas. Sin embargo, sus efectos sobre las magnitudes estimadas mediante el modelo resultó ser un orden de magnitud menor que la diferencias propias del ajuste de los datos experimentales mediante el modelo propuesto.

Tabla 1. ρ_l , ρ_{nx} y H_0 en las direcciones x y z de las muestras.

Muestra	ρ_{jx} (mΩcm)	ρ_{nx} (mΩcm)	H_{0x} (kA/m)
62	0.007	0.078	26.2
82	0.009	0.161	32.0
Muestra	ρ_{jz} (mΩcm)	ρ_{nz} (mΩcm)	H_{0z} (kA/m)
62	0.019	0.202	15.2
82	0.023	0.37	34.5

El primer campo crítico de las uniones puede ser calculado mediante la expresión 3

$$H_{c1p} = \frac{\phi_0 [\ln \frac{1}{\gamma} + \gamma]}{4\pi\mu_0\lambda^2}, \quad (4)$$

donde $\gamma = 0.423$ [18], μ_0 es la permitividad del vacío y ϕ_0 es el cuanto de flujo.

De la expresión 4 y con los valores de H_{c1p} estimados de las curvas de $\rho - J$ que resultaron ser de 1.6 y 3.2 kA/m en ambas direcciones de las muestras 62 y 82, respectivamente, se puede obtener los valores de λ correspondientes a las muestras estudiadas si se usan los valores de l calculados mediante la ecuación 3 (ver tabla 2). Este valor de la longitud de penetración de London es en general un promedio que varía entre λ_{ab} que corresponde a la longitud de penetración del plano ab de las cristalitas y $\sqrt{\lambda_{ab}\lambda_c}$, que se refiere al los planos ac y bc [7]. El mismo depende de la orientación de las cristalitas respecto al campo intergranular. Se observa que los valores obtenidos mediante nuestro método son en general

diferentes a λ_e , las causas de estas diferencias se han expuesto anteriormente.

Un cálculo sencillo permite estimar el ángulo medio de orientación de los defectos planares a partir de la expresión $\vartheta = \vartheta_0 \ln(l/\xi)$. En nuestro caso los valores obtenidos de ϑ para los diferentes l son $\vartheta \approx 11^\circ$ que concuerda con lo reportado en la literatura [19]. Otro aspecto que llama la atención es que la presión de compactación final modifica las propiedades intragranulares de las muestras. Esto se manifiesta en una clara disminución de λ . Por otro lado, la anisotropía a nivel de muestra que se debe fundamentalmente a una distribución no uniforme de los efectos de la presión a lo largo del eje de la muestra cilíndrica, disminuye con el aumento de la presión y se manifiesta en una menor diferencia entre las magnitudes medidas en ambas direcciones. El incremento de la presión de compactación parece producir, además, un incremento del número de defectos intragranulares que se evidencia en un aumento de la resistividad del estado normal de los defectos planares. Finalmente, las propiedades de los defectos planares de las muestras también mejoran con el incremento de la presión de compactación, lo que se evidencia en una disminución de las dimensiones de los vórtices de AJ y un incremento de su segundo campo crítico.

Tabla 2. Valores de l y λ obtenidos de las ecuaciones 3 y 4 en las direcciones x y z de las muestras.

Muestra	λ_x (Å)	λ_z (Å)	l_x (Å)	l_z (Å)
62	4900	4616	399	523
82	3282	3311	361	348

IV. CONCLUSIONES

En este artículo hemos aplicado el modelo de "flux-flow" de vórtices de AJ propuesto por A. Gurevich [4] a muestras policristalinas de Bi-2223 dopadas con Pb, Ca y Cu en dos direcciones principales de las mismas a partir de mediciones de $I - V$. El cambio de concavidad de las curvas de $\rho - J$ para valores bajos de la densidad de corriente de excitación de las muestras parece estar vinculado a la aparición de un mecanismo de disipación por "flux-flow" de AJ permitiendo la estimación del primer campo crítico asociado a este tipo de vórtices.

El incremento de la presión de compactación uniaxial en la elaboración de las muestras antes mencionadas modifica las propiedades intragranulares de las mismas, disminuyendo la longitud de penetración de London promedio de las cristalitas.

Las propiedades de los defectos planares intra-granulares también se modifican con el incremento de la presión, lo cual se expresa en una disminución de l y un aumento del primero y segundo campos críticos de la superconductividad que involucra los defectos planares, H_{c1p} y H_0 , respectivamente. Igualmente la resistividad del estado normal de los defectos planares también aumenta con la presión.

Los resultados experimentales también muestran que el incremento de la presión se manifiesta en una disminución de la anisotropía de los parámetros medidos en las dos

direcciones principales que corresponden a la dirección de compactación uniaxial y a otra perpendicular a esta.

La estimación de H_{c1p} a partir de las curvas de $\rho - J$ debe ser comparada con los resultados que ofrece el uso de la curva de flujo atrapado a partir de mediciones en muestras compactadas a diferentes presiones y medidas a diferentes temperaturas, con el objetivo de extraer conclusiones sobre las ventajas y desventajas de ambos métodos para estimar H_{c1p} . Una dificultad que presenta el método propuesto aquí es que si los vórtices de AJ poseen cierta energía de anclaje, podrían aparecer y no ser detectados a través de la correspondiente disipación de "flux flow" en las curvas de $\rho - J$, aparentando un H_{c1p} superior al real. Esto podría estar ocurriendo en el caso de la muestra 82 que presenta un alto valor de H_{c1p} a 90 K. En ese caso, las mediciones de H_{c1p} son más efectivas mediante curvas de magnetización vs intensidad de campo magnético en muestras en forma de polvo [9].

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por el Proyecto CAPES-MES No. 104/10.

REFERENCIAS

[1] D. Larbalestier, A. Gurevich, D. Matthew Feldmann, and A. Polyanskii. *Nature*, 414(368), 2001.
[2] P. Muné and E. Govea-Alcaide. *Rev. Mex. Fis.*, 46(581), 2000.
[3] A. Gurevich. *Phys. Rev. B*, 46,3187(R) (1992).

[4] A. Gurevich, M. S Rzczowski, G. Daniels, S. Patnaik, B. M. Hinaus, F. Carillo, F. Tafuri, and D. C. Larbalestier. *Phys. Rev. Lett.*, 88(9), 097001 (2002).
[5] A. Borroto, L. Del Río, M. Arronte, T.H. Johansen and E. Altshuler. *Appl. Phys. Lett*, 105 (202604), 2014.
[6] A. Borroto, A. S. García-Gordillo, L. Del Río, M. Arronte and E. Altshuler *Supercond. Sci. Technol*, 28(075008), 2015.
[7] Terry P. Orlando and Kevin A. Delin. *Foundation of Applied Superconductivity*, volume 44. 1991.
[8] A. Gurevich and D. Cooley. *Physical Review B*, 50(183), 1994.
[9] M. Hernández-Wolpez, A. Cruz-García, O. VázquezRobaina, R.F. Jardim, and P. Muné. *Physica C*, 525-526(84-88), 2016.
[10] E. Altshuler, S. Garcia, and J. Barroso. *Physica C*, 177(61.66), 1991.
[11] P. Mune, E. Govea-Alcaide, and R.F. Jardim. *Physica C*, 384(491-500), 2003.
[12] H. C. Montgomery. *J. Appl. Phys.*, 42(2971-2975), 1971.
[13] J. Orenstein and A. J. Millis. *Science*, 288(468), 2000.
[14] E. Govea-Alcaide, P. Muné, and R. F. Jardim. *Physica C*, 56(408 - 410), 2004.
[15] C. A. M. dos Santos, A. de Campos, M. S. da Luz, B. D. White, J. J. Neumeier, B. S. de Lima, and C. Y. Shigue. *J. Appl. Phys*, 110(083703), 2011.
[16] J.D.. Wasscher. *Philips Res. Rep.*, 16(301), 1961.
[17] J. Hänisch, A. Attenberger, B. Holzapfel, and L. Schultz. *Physical Review B*, 65(052507), 2002.
[18] A. Gurevich. *Physical Review B*, 48(17), 1993.
[19] M. Mora, Tesis de doctorado, Universidad de Zaragoza, España, 1998.

PRELIMINARY QUANTIFICATION OF FREELY EXPLORING *ATTA INSULARIS*

CUANTIFICACION PRELIMINAR DE LA EXPLORACION LIBRE EN *ATTA INSULARIS*

A. REYES, G. I. RODRÍGUEZ AND E. ALTSHULER[†]

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

[†] corresponding author

Recibido 1/9/2016; Aceptado 31/10/2016

PACS: 87.23.-n, 05.45.-a, 05.65.+b

Ants are social insects that typically use pheromone traces to self-organize long foraging lines without any centralized organization [1]. However, a very basic question arises: how a single ant explores new territories without any chemical or “topographical” clues? To the authors knowledge, the question is unanswered in the literature. In this paper, we offer a preliminary quantification of the free exploration of the Cuban leaf-cutter ant *Atta insularis* (known as *bibijagua* in Cuba) [2–6].

in the same way, thoroughly cleaning the plastic arena with ethanol between repetitions.

Images were averaged and the result was subtracted from each photogram, in order to distinctly visualize the moving object (i.e., the ant), on an immobile and homogeneous background. Then, images were binarized using an appropriately threshold, so the ant trajectory can be easily converted into a list of positions and times. The right panel of Fig.1 shows a typical trajectory.

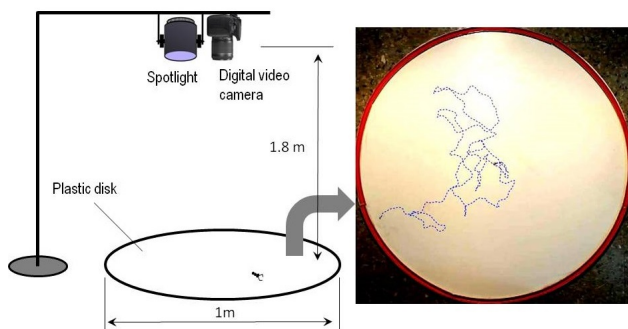


Figure 1. Experimental setup. Left panel: sketch of the experimental set up. The camera was a CANON EOS Rebel T3. Videos were taken at 25 frames per second, with a resolution of 4272 pixels \times 2848 pixels. Right panel: Actual photogram of the experimental arena, where an experimental trajectory of a single ant is represented as a dotted line. The starting point of the trajectory is at the geometrical center of the circular arena.

A typical experiment can be described as follows. A single individual of *Atta insularis* is collected from a foraging line in natural conditions, immediately taken to the laboratory, and released at the center of a 1-meter-diameter circular area made of white plastic. The trajectory of the ant is then followed by a digital camera located 1.8 meters above the center of the arena, until the ant reaches the edge of the circular platform. The illumination is provided by a 250-watt incandescent lamp located near the camera, equipped with a light diffuser, as sketched in the left panel of Fig.1. (Our setup does not produce temperatures or illuminations on the arena bigger than the maxima experienced by ants out of the nest in natural conditions). Once the experiment has finished, the ant is released back in its natural foraging area. The experiment is replicated for several individuals collected

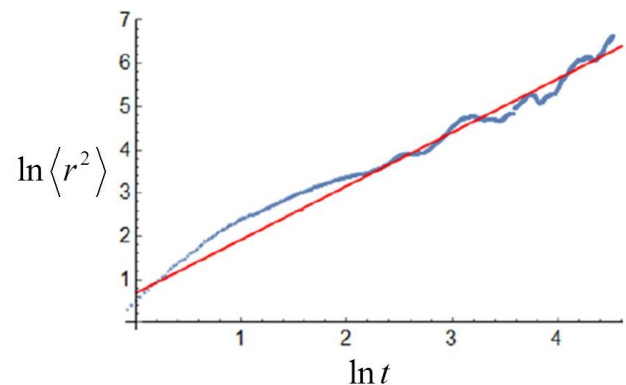


Figure 2. Mean Squared Displacement (MSD). The figure shows the logarithm of the MSD of the ants against the logarithm of time. The graph comprises the data from a sample of 25 experiments with individual ants. The straight line corresponds to a Log-Log graph of the power law $\langle r^2 \rangle \sim t^\gamma$ where the exponent $\gamma = 1.74 > 1$, suggests *super-diffusion*.

The first parameter we measured was the position of the ants as time goes by, which was used to calculate the Mean Squared Displacement (MSD), shown in Fig.2. In the figure, it is included the data of 25 experiments (corresponding to 25 ants). The straight line fitting the data can be described as $\langle r^2 \rangle \sim t^\gamma$ with $\gamma = 1.74$ (here, r is the absolute distance from the ants to the center of the arena). Since the value of the exponent is bigger than 1, the motion can be classified as *super-diffusive* –i.e., there is a direction persistence beyond a pure random walk. Super-diffusive behavior is expected when animals move in an “anisotropic” environment. For example, bacteria moving “chemotactically” in a chemical gradient of nutrients, or “phototactically” in a light gradient

[7]. In the case of ants, we would expect a direction-biased walk if our arena was illuminated from one side (ants would try to escape from light), but that is not the case. A strongly super-diffusive behavior could be also expected if many ants were released on the arena at the same time, since they would chase each other due to the deposition of pheromone tracks –but that is neither our case–. The super-diffusive behavior we have found in isolated ants might be related to “direction memory” of the individuals, or perhaps a short range (but not long range) lack of memory (“Alzheimer walk”, [8]). However, we have not quantified in detail the temperature and illumination homogeneities in the arena, so we cannot discard possible effects on the diffusivity. This will be done in the future.

The second element we have computed is the statistics of turn angles of the ant. The inset of Fig.3 illustrates how it was measured. First, the trajectory of one ant was divided into straight segments connecting two consecutive positions of the individual, separated by a time interval of 0.8 seconds (20 frames). The turn angle was defined as the deviation angle from one trajectory segment, to the next.

The main frame of Fig.3 shows the statistical distribution of the resulting angles, comprising all trajectories measured on 25 different experiments. It can be immediately seen the dominance of small turn angles: most of the time, ants explore through smooth trajectories, and just eventually stop and perform a major turn. A further observation is that the average length of the right bars (especially near the center of the distribution) is significantly bigger than that of the left bars, i.e., left turns are more probable (due to our sign convention, it corresponds to a “thicker” right side of the statistical distribution shown in Fig.3). That opens the question if ants are “intrinsically left handed”, so to speak.

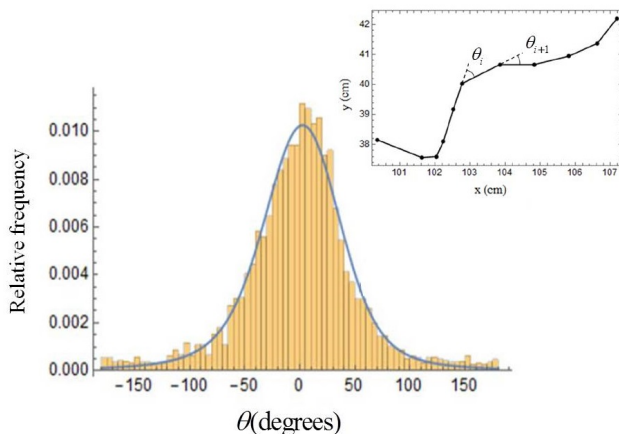


Figure 3. Frequency distribution of turn angles. The figure represents the statistical distribution of turn angles, and comprise the angles measured in all trajectories of all individual ants. The inset indicates how the turn angle is defined.

Some authors have proposed that this asymmetry can result in adaptive advantages. Studies with *Temnothorax albipennis* ants show that they apparently use their right eye more the left eye to recognize reference points [9] (however, *Atta insularis* ants are practically blind, so they are not likely to use any reference points in our experiments). Another

example of these antecedents is illustrated in [10], also with *Temnothorax albipennis*, showing more left turns when ants explore new territories for the construction of a nest.

The continuous line in Fig.3 corresponds to a fit of a α -stable distribution (see, for example, [11]) which is able to reproduce the “power-law-like” tails of the bell-shaped distribution.

During exploration, every few seconds ants stop and perform bigger turns whose average is of the order of 90 degrees. In analogy with the “run-and-tumble” motion of *E. coli* [7,12–14] we define a “tumble” as a bigger turn and a *run* as the fast segment between two consecutive tumbles. Then, we have found that the statistical distribution in the durations of runs follows an exponential law, as “classically” expected for bacteria. However, more statistics must be collected to completely discard a power law.

In summary, we have preliminarily characterized the free exploration of a social insect (the Cuban endemic ant *Atta insularis*) using parameters typically used in the area of micro-swimmers. On the one hand, we have found a super-diffusive behavior in the individual ants –which implies a certain level of direction preference of unknown origin. Secondly, we have found clues indicating that free-exploring ants are slightly “left-handed”, i.e., they prefer to turn left instead of right during exploration. These results –especially the latter– must be corroborated by a larger statistical sample of individuals, and should be extrapolated to other, non-social, insect species. Finally, the quantification of the temperature and illumination homogeneities must be performed in the future.

REFERENCES

- [1] B. Hölldobler and E. Wilson, *The Ants* (Cambridge, Belknap, 1990).
- [2] E. Altshuler, O. Ramos, Y. Núñez, J. Fernández, A. J. Batista-Leyva, and C. Noda, *Am. Nat.* **166**, 643 (2005).
- [3] C. Noda, J. Fernández, C. Pérez-Penichet and E. Altshuler, *Rev. Sci. Inst.* **77**, 126102 (2006).
- [4] S. C. Nicolis, J. Fernández, C. Pérez-Penichet, F. Tejera, O. Ramos, D. J. T. Sumpter and E. Altshuler, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 268104 (2013).
- [5] F. Tejera and E. Altshuler, *Rev. Cubana Fís.* **32**, 49 (2015).
- [6] A. Reyes, F. Tejera and E. Altshuler, *Rev. Cubana Fís.* **33**, 44 (2016).
- [7] H. C. Berg *E. coli in motion* (Springer, New York, 2004).
- [8] G. Viswanathan, M. Da Luz, E. Raposo, H. Stanley, *The Physics of Foraging* (Cambridge University Press, New York, 2011).
- [9] N. Basari, A. C. Bruendl, C. E. Hemingway, N. W. Roberts, A. B. Sendova-Franks and N. R. Franks, *J. Exp. Biol.* **217**, 944-954 (2014).
- [10] E. R. Hunt, T. O’Shea-Wheller, G. F. Albery, T. H. Bridger, M. Gumm and N. R. Franks, *Biol. Lett.* **10** (12), 0945 (2014).

- [11] B. Mandelbrot, *Int. Economic Rev.* **1**, 79 (1960).
- [12] E. Altshuler, G. Miño, Pérez-Penichet, Del Río, A. Lindner, A. Rousselet and E. Clément, *Soft Matter* **9**, 1864 (2013).
- [13] N. Figueroa-Morales, E. Altshuler, A. Hernández-García, A. Lage-Castellanos and E. Clément, *Rev. Cubana Fis.*, 2013, **30**, 3 (2013).
- [14] N. Figueroa-Morales, G. L. Miño, A. Rivera, E. Altshuler, R. Caballero, E. Clément and A. Lindner, *Soft Matter* **11**, 6284 (2015).

CAMBIOS INFORMACIONALES EN BIOMOLÉCULAS CAUSADAS POR RADIACIONES IONIZANTES: LO QUE PUEDE DECIR LA ENTROPÍA DE TSALLIS

INFORMATIONAL CHANGES IN BIOMOLECULES CAUSED BY IONIZING RADIATIONS: WHAT TSALLIS ENTROPY CAN SAY

L. RODRÍGUEZ^{a,b}, R. CÁRDENAZ^{a†}, L. GONZÁLEZ^a, O. RODRÍGUEZ^{a,b}

a) Universidad Central "Marta Abreu" de Las Villas, Cuba ; rcardenas@uclv.edu.cu[†]

b) Centro de Estudios Ambientales (EULA), Universidad de Concepción, Chile

† autor para la correspondencia

Recibido 13/2/2015; Aceptado 1/11/2016

PACS: Effects of radiation and external fields on biomolecules, cells and higher organisms 87.50.-a, Entropy 05.70.-a, 65.40.Gr; Information theory, 89.70.1c

La entropía es uno de los conceptos más importantes de las Ciencias Naturales. Su interpretación como una densidad logarítmica de microestados en la Física Estadística y ha sido extrapolada a Teoría de la Información, Ecología Economía y otras ciencias. Su primera formulación fue en el siglo XIX e implicaba extensividad (aditividad)

$$S(A + B) = S(A) + S(B). \quad (1)$$

Esta propiedad es implementada a través de la función logarítmica con la formulación de entropía de Boltzman Gibbs(BG)

$$S = -k \sum_n p_n \ln p_n, \quad (2)$$

donde p_n es la probabilidad del microestado n -ésimo y k es la constante de Boltzman.

En sistemas donde las fuerzas predominantes son las gravitacionales (de largo alcance) la extensividad ha sido cuestionada. En 1988 Tsallis formuló un nuevo concepto de entropía no extensiva

$$S_q = -k \frac{1 - \sum_n p_n^q}{1 - q}. \quad (3)$$

La nueva suma quedaría de la siguiente forma:

$$\frac{S_q(A + B)}{k} = \frac{S_q(A)}{k} + \frac{S_q(B)}{k} + 1 - q \frac{S_q(A)}{k} \frac{S_q(B)}{k}, \quad (4)$$

donde q es el parámetro de no extensividad.

Cuando $q = 1$, se recupera la entropía de BG, $q > 1$ es el caso subextensivo, y $q < 1$ es el superextensivo [3].

Una manera de codificar la información química de las proteínas es formando palabras, donde las letras son los diferentes aminoácidos que la componen [1]. La longitud de la palabra es a lo que llamamos orden, donde el orden 0 sería la palabra formada por 1 aminoácido, de orden 1 las formadas por dos aminoácidos y así sucesivamente.

Estudiamos un fragmento de la proteína *Bacillus Subtillis* expuesta a radiación cósmica ionizante. La secuencia en su estado salvaje es **L S Q F M D Q T N P L A E L T H K R R L S A**, y la secuencia de codones que codificó este fragmento es **CTT TCT CAA TTC ATG GAT CAG ACG AAC CCG GCT GAA TTA CAC AAG CGT CTG TCA GCA**.

La radiación cósmica produce mutaciones en los genomas, quedando la proteína de la forma **P S L F M D Q T N P L V E L T Y K P R L L P**. Formamos todas las posibles palabras con longitudes desde 1 hasta 5 aminoácidos, desde el orden 0 hasta el orden 4. La longitud de la cadena es de 22 aminoácidos, dando 22 palabras de orden 0, 42 de orden 1, 60 de orden 2, etc. Computamos la probabilidad de que aparezca un aminoácido en la cadena

$$p_n = \frac{n}{N}, \quad (5)$$

donde n es el número de veces que aparece el aminoácido en la palabra y N el número de palabras. Como medida de la información utilizamos las formulaciones de entropía de BG y Tsallis

$$S = -k \sum_1^{22} p_n \ln p_n, \quad S_q = -k \frac{1 - \sum_1^{22} p_n^q}{1 - q}. \quad (6)$$

Esta proteína fue sometida a diferentes entornos radiacionales:

1. Proteína en su estado salvaje (no irradiada).
2. Mutada por iones pesados (helio, carbono, silicio e hierro).
3. Mutada por rayos X.

Para cada caso calculamos la entropía de Tsallis y BG (ver Tabla 1).

Tabla 1. Cálculo de la entropía de la proteína *Bacillus Subtilis* sometida a varios entornos radiacionales.

Entorno Rad	BG	Tsallisq1,2	Tsallisq3,4	Tsallisq1,4
1- P salvaje	$3,9700 * 10^{-23}$	$7,7800 * 10^{-24}$	$5,8568 * 10^{-24}$	$4,4131 * 10^{-24}$
2- P iones	$3,9549 * 10^{-23}$	$7,6703 * 10^{-24}$	$5,7579 * 10^{-24}$	$4,3270 * 10^{-24}$
3- P rayos X	$3,8394 * 10^{-23}$	$7,9405 * 10^{-24}$	$6,0396 * 10^{-24}$	$4,6018 * 10^{-24}$

En todos los casos la entropía de Tsallis resultó menor que la de BG. Esto era de esperar, pues se trabajó con el caso subextensivo ($q > 1$) de la entropía de Tsallis. Respecto a la proteína salvaje, se nota una tendencia a un aumento de la entropía después de la irradiación con rayos X, y una disminución después de la irradiación con iones pesados.

En resumen, en este trabajo se evaluó la afectación informacional de los genomas estudiados cuando se someten a un ambiente radiacional, vinculando la Física Estadística con la Teoría de la Información. Las tendencias observadas requerirán de confirmación al investigar un mayor número de casos, ya que este es un trabajo en un estadio aún preliminar.

REFERENCIAS

- [1] S. J. Barigye, Teoría de información en la codificación de la estructura química. Tesis de Doctorado en Ciencias Químicas, Universidad Martha Abreu de las Villas, Santa Clara (2013).
- [2] C. Marante, F. Castro-Smirnov, O. Rodriguez-Hoyos, A. Días de Toledo, J. Mod. Phys., 3, 431-437 (2012).
- [3] C. Marante, F. Castro-Smirnov, O. Rodriguez-Hoyos, A. Días de Toledo, Nonexistence and Tsallis Entropy in DNA Fragmentation Patterns by Ionizing Radiation (2012).

EFECTOS FÍSICOS INDUCIDOS EN CULTIVOS *IN VITRO* EXPUESTOS A CAMPOS ACÚSTICOS

INDUCED EFFECTS *IN VITRO* CELL CULTURE EXPOSED TO ACOUSTIC FIELD

A. VARGAS^{bc}, I. C. NAVARRETE^{bc}, I. GONZÁLEZ^d y M. CAMACHO^{ab†}

a) Departamento de Biología, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia; mmcachon@unal.edu.co[†]

b) Centro Internacional de Física (CIF), Laboratorio de Biofísica, Bogotá, Colombia.

c) Departamento de Ciencias Básicas, Universidad Manuela Beltrán, Bogotá, Colombia.

d) Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), Instituto de Tecnologías Físicas y de la Información, Madrid, España.

† autor para la correspondencia

Recibido 5/7/2016; Aceptado 12/10/2016

El uso de ultrasonidos en aplicaciones médicas como cirugía ultrasonica, imágenes diagnósticas y en la actualidad, aplicaciones de manipulación y separación celular, han fomentado el estudio de los efectos físicos y biológicos asociados con la exposición de poblaciones celulares a campos acústicos. El interés por determinar estos efectos radica en el hecho de que este conocimiento permite optimizar el uso de ultrasonidos e identificar nuevas aplicaciones. Entonces, para mejorar su aplicación en cultivos *in vitro*, a continuación se describen los efectos generados sobre células sometidas a un tratamiento ultrasónico.

The uses of ultrasounds in medical applications like ultrasonic surgery, diagnosis, and nowadays in cellular separations and manipulations, has foment the study about physical and biological effects, related to exposure of cells at an acoustic field. The interest in determining these effects could help to optimize the ultrasound uses, and identify new applications. In order to improve the uses in applications where *in vitro* cell cultures are used, this manuscript review the effects generated in cells when are exposed to ultrasonic fields.

PACS: Biological effects of acoustic and ultrasonic energy, 87.50.Y; Sound waves, 47.35.Rs; Cell processes, 87.17.-d

I. INTRODUCCIÓN

Con los avances recientes en nanotecnología y microfabricación durante los últimos años se ha revivido el interés por el desarrollo de nuevos métodos de medición de elasticidad celular, en los que se aprovecha la formación de campos acústicos estacionarios al interior de un microcanal lo que permite, sin contacto directo sobre células en suspensión, medir su compresibilidad o módulo de elasticidad volumétrico [1–3]. Además, del desarrollo en la medición de propiedades físicas, estos avances han mejorado técnicas de separación y manipulación celular, basadas en dispositivos que trabajan con fluidos a escala micrométrica o microfluidos, ofreciendo una oportunidad de explotar variedad de principios y respuestas que se presentan a estas escalas y que son diferentes a los observados a escala macroscópica [4]. Por ejemplo, el comportamiento laminar del flujo en el cual predominan fuerzas de carácter viscoso lo que conlleva alta capacidad de control en dispositivos microfluídicos [5].

Debido a las características de los flujos a escala micrométrica es posible clasificar las tecnologías basadas en la manipulación de células con microfluidos en dos grupos: (i) sistemas pasivos donde la manipulación se logra con la ayuda de fuerzas inerciales, filtros y mecanismos de adhesión o (ii) sistemas activos en los que se usa un campo de fuerza externo, como el gravitacional, magnético, eléctrico o acústico, para manipular la muestra [4].

En particular, las herramientas en microfabricación han

ayudado en la evolución de sistemas activos basados en las técnicas de separación Field Flow Fractionation (FFF) o de Campo-Flujo, al disminuir las dimensiones en los dispositivos de separación hasta escala micrométrica [6, 7]. Las FFF, propuestas por Giddings durante la década de los 60 [8] y desarrolladas durante los años 80 y 90 [9], emplean canales rectangulares delgados de tipo Hele-Shaw por los cuales fluye axialmente una muestra suspendida en un líquido vector, cuyos elementos constitutivos pueden ser separados por la acción de diferentes tipos de campos de fuerza [10].

Actualmente, junto con la miniaturización de los dispositivos en las FFF, se ha generado un interés creciente por acoplar a los microcanales de separación campos acústicos ultrasónicos, lo cual ha permitido la separación de partículas [11, 12], y el enriquecimiento de poblaciones celulares presentes en diferentes mezclas [13, 14].

El creciente interés por campos acústicos ultrasónicos en microdispositivos se debe, a que, en presencia de este campo las células experimentan fuerzas de carácter mecánico asociadas con su densidad, volumen y compresibilidad, lo cual hace atractivo su uso, porque a diferencia del método de ensamble magnético en el que se etiquetan las células con sondas magnéticas, o la dielectroforesis donde normalmente se emplea un medio conductor, que puede afectar crecimiento y fisiología celular [15, 16], en este caso no es necesario marcate ni medio particular para lograr separar o manipular las células.

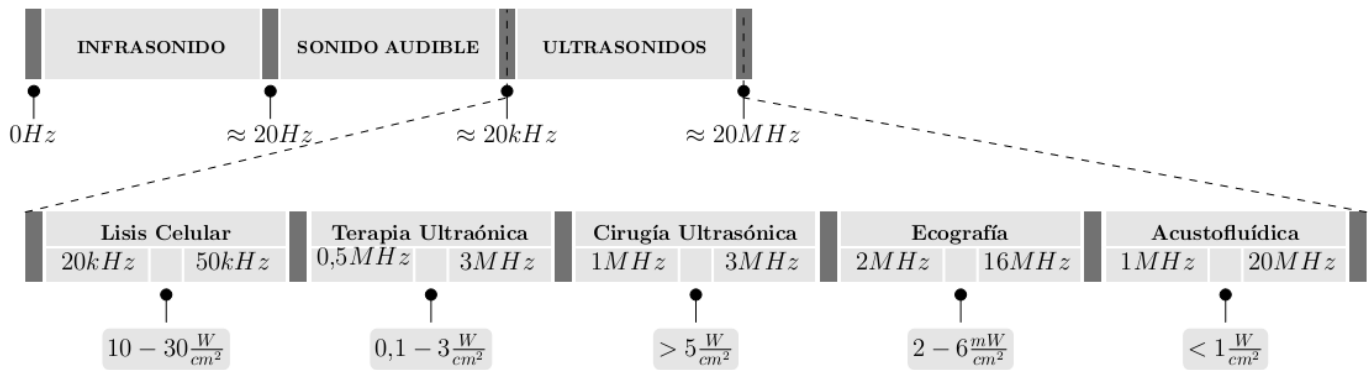


Figura 1. Escala de frecuencia y potencias para ultrasonidos usados en diferentes aplicaciones.

Además, este tipo de campos permite controlar células para investigar interacciones célula-célula, y célula-ambiente [16,17]. Más aún, en estas aplicaciones se emplean frecuencias del orden de los ultrasonidos, rango en el cual el impacto en viabilidad, función y expresión génica celulares se presume bajo para intensidades $< 1 \text{ W/cm}^2$, que están en el orden de las usadas comúnmente en diagnóstico por imágenes ultrasónicas [18,19].

Aunque se afirma que la exposición de células a campos acústicos no causa daño considerable en las poblaciones celulares, se han realizado estudios *in vitro*, en los que se han establecido efectos generados en diferentes poblaciones expuestas a éstos.

Por ejemplo, Bocchi y colaboradores evaluaron el impacto en morfología y conectividad de células del sistema nervioso central (neuronas y microglia), observando que la complejidad de la red neuronal aumentaba después de su exposición a ultrasonidos [20]. Por otro lado, Hultstrom *et al.* midieron la tasa de proliferación de células adherentes como función del tiempo de exposición, determinando para células COS7 sometidas a ultrasonidos de amplitud igual a 0,85 MPa y con frecuencia de 3 MHz, que su tiempo de duplicación celular se mantenía entre 24 h a 48 h, comparado con células control [21].

También, se ha encontrado que el campo acústico genera cambios en el potencial de membrana en cultivos de la línea K562 de leucemia mieloide crónica expuestos a ultrasonidos de diferente intensidad con una frecuencia de 1,1 MHz [22]. Por último, Radel *et al.*, evaluaron levaduras en suspensión expuestas a ondas ultrasónicas estacionarias de 2 MHz como una función del tiempo de exposición, encontrando que su viabilidad disminuía significativamente por la presencia de etanol en el medio [23].

Adicionalmente a estos estudios que muestran el impacto de campos acústicos, del rango de los ultrasonidos, en células mamíferas o levaduras, también se han realizado investigaciones en células de plantas, en particular, Bohm y colaboradores encontraron que al incrementar la densidad de energía de 0 J/m^3 a 70 J/m^3 y el tiempo de exposición a un campo acústico estacionario de 2,42 MHz, la viabilidad de un cultivo de *Petunia hybridase* reducía 35 % [24].

Por otro lado, el uso de ultrasonidos en biorreactores ha evidenciado que la exposición de células a un campo acústico puede incrementar la productividad en un proceso biológico [25], por ejemplo, Schlafer *et al.*, reportaron que la producción de etanol por *S. cerevisiae* aumenta a más del doble cuando las células son expuestas intermitentemente a ultrasonidos con frecuencia de 25 KHz y potencia de entrada de 300 W/m^3 , efecto que se anula por la exposición continua de las células al campo [26].

Estos trabajos evidencian los efectos que tiene un campo acústico ultrasónico, particularmente, cuando éste es usado en aplicaciones de separación [14,19], manipulación celular [16,17,27], desarrollo de biorreactores [25,28] o construcción de biofiltros de bacterias y levaduras [29,30], que han permitido establecer para ciertas poblaciones celulares la relación entre su viabilidad y parámetros como intensidad, frecuencia, tiempo de exposición y tipo de onda.

Entonces, con el objetivo de definir los efectos físicos que genera un campo acústico, en el rango de los ultrasonidos en una suspensión de células, a continuación se describen éstos asociados con la frecuencia, el tipo de onda y la fuerza de radiación acústica. Posteriormente, se exponen resultados experimentales relacionados con la medición de viabilidad celular en cultivos *in vitro* de diferentes líneas celulares expuestas a estos campos y por último, se asocian estos cambios en viabilidad con efectos generados a nivel molecular y estructural.

II. EFECTO DE LA FRECUENCIA Y ENERGÍA

Las ondas sonoras se clasifican según su frecuencia en infrasonidos, con frecuencias entre 0 Hz y 20 Hz, sonidos audibles, para rangos de 16 Hz hasta 20 kHz y ultrasonidos, que son ondas sonoras con frecuencias mayores a 20 kHz [33]. Durante muchos años las ondas sonoras en el rango de los ultrasonidos han sido ampliamente usadas en diferentes aplicaciones médicas e industriales tales como: limpieza de superficies [34], cirugía ultrasónica e imágenes diagnósticas [35] y recientemente en el desarrollo de técnicas de separación o manipulación celular en dispositivos microfluídicos, conocidas con el término de acustoflúidica [36].

La frecuencia y potencia usadas en cada una de éstas, figura 1, depende del efecto físico que se desee generar o aprovechar. Por ejemplo, en el caso de lisis celular y cirugía ultrasónica el efecto de cavitación, el cual ocurre con mayor regularidad al emplear frecuencias $< 1 \text{ MHz}$ [18], es deseable, ya que permite, en la lisis, romper la membrana celular y, en cirugía, destruir cálculos o inducir necrosis en terapias contra cáncer sin dañar tejidos cercanos [18].

Sin embargo, en aplicaciones como imágenes diagnósticas y manipulación celular, la cavitación es un efecto no deseado, puesto que en estos casos se busca, después de exponer la muestra a ultrasonidos, mantener la viabilidad del tejido o células expuestas, que es afectada por la formación y colapso de burbujas. Estos fenómenos causan incrementos considerables en la temperatura del fluido, $> 4000 \text{ }^\circ\text{C}$, y, además, generan cambios en la presión del líquido, los cuales puede alcanzar hasta 1000 atm , afectando la integridad celular debido a que ocurren extremadamente rápido. Por ejemplo, la temperatura en las cercanías de una burbuja en formación o en colapso tiene un aumento mayor a $110 \text{ }^\circ\text{C/s}$ [25].

Otro efecto físico asociado con la frecuencia y potencia de la onda es el calentamiento generado cuando el ultrasonido es absorbido por el material del dispositivo acústico, lo que disipa la energía mecánica de la onda y la convierte en calor [18].

Es importante resaltar que esta disipación de energía, depende de: (i) El tipo de material con el cual está construido el dispositivo que para los resonadores empleados en manipulación celular son de baja pérdida tales como silicio, vidrio y acero, (ii) Las características físicas del fluido usado, como su viscosidad, en donde por lo general, los medios empleados en suspensiones celulares están hechos a base de agua y (iii) La frecuencia, que genera poca absorción de energía entre $1 - 10 \text{ MHz}$ [18].

Los efectos biológicos, inducidos por calentamiento de la muestra pueden variar dependiendo del tipo celular, la tasa de calentamiento y el tiempo de exposición. Además, temperaturas letales para un organismo pueden ser tolerables para células en cultivo *in vitro* [18].

Por último se debe resaltar que el aumento o disminución de la temperatura en un cultivo *in vitro* puede generar efectos en las células que llevan a respuestas a nivel molecular. Esta situación se evidencia, al disminuir la temperatura, en el estancamiento de la tasa de crecimiento generado por la detención del ciclo celular y, al aumentar la temperatura, por la expresión de proteínas de choque térmico y la denaturación y agregación de proteínas [18].

III. EFECTO DE LA FRECUENCIA Y LA ENERGÍA

Para definir los efectos generados por el tipo de onda sobre una suspensión de células cuando se exponen a un campo acústico en el rango de los ultrasonidos es necesario recordar que un movimiento oscilatorio de pequeña amplitud en un fluido compresible es denominado onda sonora. Cuando

estas ondas se propagan en un fluido se produce en todos sus puntos compresiones y rarefacciones [31], que están asociadas con diferencias en la presión del líquido, formando lo que se conoce como un campo escalar de presiones o campo acústico. Dependiendo si la onda sonora que se propaga en el fluido es viajera, onda que se mueve libremente en el espacio, o estacionaria, el campo acústico tiene forma diferente, figura 2.

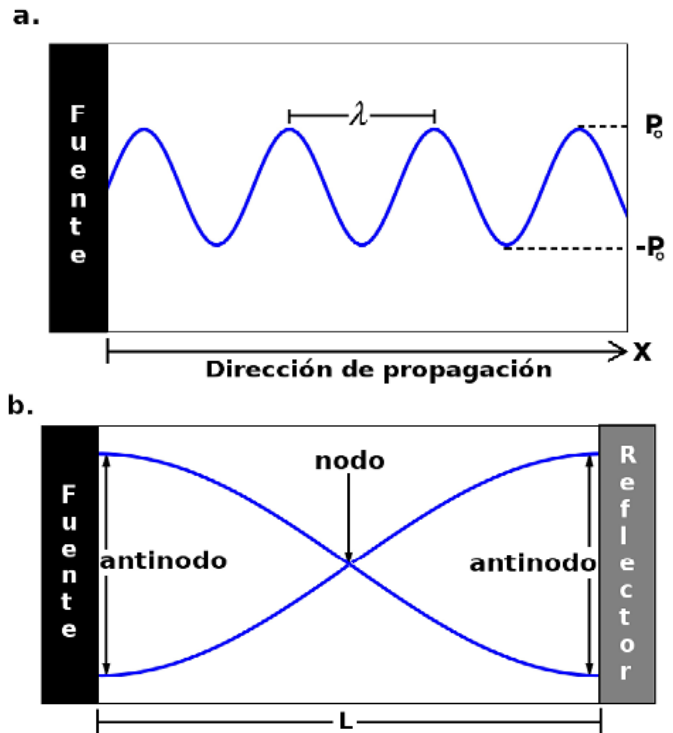


Figura 2. Campo de presión de ondas sonoras estacionarias y viajeras. a. Campo acústico de una onda viajera que se propaga en dirección x . b. Campo acústico de una onda estacionaria confinada en una región de longitud L .

En el caso de una onda sonora viajera propagándose en dirección x positiva, figura 2a, el campo de presiones está dado por la función [31]

$$p(x; t) = p_0 \sin(kx - \omega t), \quad (1)$$

donde p_0 es la amplitud máxima de presión la cual es constante para una onda que se propaga sin pérdida de energía, figura 2a, k es el número de onda, el cual se relaciona con la longitud de onda λ mediante la ecuación $k = 2\pi/\lambda$ y ω es la frecuencia angular. Por otro lado, en el caso de ondas sonoras estacionarias, las cuales se emplean comúnmente en procesos de separación y manipulación celular, el campo de presión está dado por la ecuación [31]

$$p(x; t) = [p_0 \cos kx] \cos \omega t, \quad (2)$$

en donde el término entre corchetes corresponde a la amplitud de presión de la onda estacionaria, que en este caso depende de la posición x . Debido a esta dependencia espacial de la amplitud se establece en la región de confinamiento L de la onda, figura 2b, zonas de amplitud de presión cero, nodos, y zonas de amplitud de presión máxima, antinodos. La cantidad de nodos y antinodos generados depende de la

frecuencia natural o de resonancia elegida, la cual está dada por la relación

$$f_n = \frac{nv}{2L}, \quad (3)$$

donde $n = 1, 2, 3, \dots$ y v es la velocidad de propagación de la onda en el medio. En la figura 2b se presenta el patrón obtenido para el caso de $n = 1$. El hecho de que las ondas sonoras estacionarias tengan una amplitud de presión variable, mientras que las ondas viajeras no, implica que células expuestas a estos dos tipos de onda pueden responder de manera diferente. En una onda estacionaria ultrasónica, las células migran hacia posiciones en las que experimentan poca presión y estrés mecánico. En cambio, células expuestas a un campo de onda viajera, permanecerán uniformemente distribuidas en el fluido experimentando mayor presión [25].

Estos efectos han sido evidenciados mediante estudios de viabilidad celular, en los cuales se concluye que las ondas estacionarias son menos deletéreas para las células que las ondas viajeras [23], sugiriendo su uso en aplicaciones relacionadas con manipulación de muestras frágiles, como células animales, o incluso en el desarrollo de métodos que permiten concentrar y recolectar biomoléculas tales como ácidos nucleicos y proteínas [32].

IV. EFECTO DE LA FUERZA ACÚSTICA

Al exponer una suspensión de células a una onda estacionaria ultrasónica al interior de un dispositivo microfluídico, las células experimentan dos fuerzas de carácter mecánico asociadas con el campo de presión generado al interior del dispositivo. La primera es una fuerza conocida como fuerza primaria de radiación acústica (F_{prm}) y la segunda es llamada fuerza de radiación acústica secundaria o fuerza de Bjerkness (F_{sec}), figura 3c y 3d.

La fuerza primaria de radiación acústica es una fuerza hidrodinámica de primer orden, generada por la interacción no lineal entre la onda incidente y la onda de dispersión producida por cada célula en suspensión. Esta fuerza tiene dos componentes, una componente axial en la dirección de propagación de la onda acústica y una componente lateral que actúa en la dirección de los planos nodales o antinodales, en los cuales la componente axial es cero, figura 3a.

La componente axial de la fuerza primaria de radiación acústica, figura 3a, está dada por la expresión [37]

$$F_{prm_x} = \frac{\pi p_0^2 V_c \beta_m}{2\lambda} \phi(\beta, \rho) \sin kx. \quad (4)$$

Donde p_0 es la amplitud máxima de presión, V_c es el volumen de la célula, β_m es la compresibilidad del medio y ϕ un parámetro adimensional conocido como factor de contraste acústico, el cual está dado por la relación

$$\phi(\beta, \rho) = \frac{5\rho_c - 2\rho_m}{2\rho_c + \rho_m} - \frac{\beta_c}{\beta_m}. \quad (5)$$

Siendo β_c la compresibilidad de la célula y ρ_c, ρ_m las densidades de la célula y el fluido respectivamente. Como

se observa en la ecuación 5 el factor de contraste acústico está definido a partir de la relación entre densidades y compresibilidades de células y fluido, por tal razón, es importante resaltar que su valor puede ser positivo o negativo, dependiendo de la densidad y compresibilidad asociados con las poblaciones celulares. Esto permite establecer la dirección de la componente axial de F_{prm} que puede ser hacia los nodos si $\phi > 0$, células blancas figura 3c, o hacia los antinodos si $\phi < 0$, células rosadas figura 3c, [38]. Además se debe notar en la ecuación 4, que la componente F_{prm_x} es estable en el tiempo y proporcional al volumen de la célula y la frecuencia.

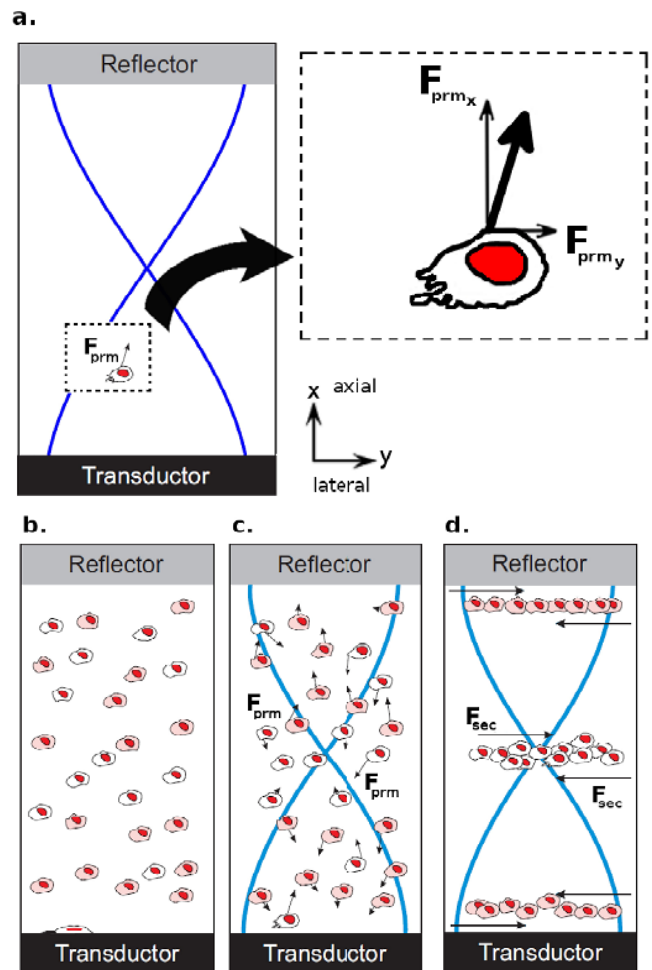


Figura 3. Efecto generado sobre una suspensión de células por la acción de una onda sonora estacionaria en el rango de los ultrasonidos. a. Componentes axial y lateral de la fuerza primaria de radiación acústica (F_{prm}). b. Células sin exposición al campo acústico. c. Acción de la fuerza primaria de radiación acústica sobre una suspensión de células. d. Acción de la componente lateral de la fuerza primaria y de las fuerzas de Bjerkness (F_{sec}).

Por otro lado, la componente lateral de la fuerza primaria de radiación acústica F_{prm_y} , se ha estimado que es dos órdenes de magnitud más pequeña que la componente axial y también depende de las características físicas de células y medio [39]. Esta componente, junto con la fuerza de radiación acústica secundaria, es responsable de iniciar y mantener la formación de agregados en los planos nodales o antinodales de la onda, figura 3d [40].

Por último, las fuerzas de Bjerkness están dadas entre células y se generan por interacción de las ondas dispersadas por cada célula cuando una población en suspensión es expuesta a un campo de onda estacionaria [40]. Esta fuerza, al igual que F_{prm} , depende de propiedades físicas de células y fluido y es dada, cuando la longitud de onda λ es más grande que el radio r de la célula y que la distancia d entre las células, por la relación [40]

$$F_{sec}(x) = 4\pi r^6 \left[\frac{(\rho_p - \rho_m)^2 (3 \cos^2 \theta - 1)}{6\rho_m d^4} v^2(x) - \frac{\omega^2 \rho_m (\beta_p - \beta_m)^2}{9d^2} p^2(x) \right]. \quad (6)$$

Donde θ es el ángulo entre la línea que une los centros de dos células y la dirección de propagación de la onda incidente, $v(x)$ la velocidad de las células y $p(x)$ la amplitud de presión de la onda acústica.

A diferencia de la fuerza primaria de radiación acústica, F_{sec} es proporcional al radio de la célula elevado a una potencia 6 e inversamente proporcional a la distancia de separación entre células, como aparece en la ecuación 6. Esta dependencia de F_{sec} con la distancia de separación implica que para distancias de $10\mu\text{m}$ la fuerza secundaria es tres órdenes de magnitud menor que F_{prm} . Este hecho fue evidenciado por Haar y Wyard en 1978 al determinar que glóbulos rojos en suspensión expuestos a una onda estacionaria de 3 MHz con una potencia de $1\text{W}/\text{cm}^2$ experimentaban una F_{prm} de 2×10^{12} N, mientras que, en contacto o separados por una distancia de $10\mu\text{m}$ se generaba entre ellos una F_{sec} de 2×10^9 N y 2×10^{14} N, respectivamente [41].

Otro aspecto importante a resaltar de las fuerzas de Bjerkness es que cuando las células se ubican en los planos nodales, $p(x) \rightarrow 0$ ecuación 6, F_{sec} puede ser atractiva o repulsiva [40], lo cual, ocurre si la línea que une los centros de dos células es paralela a la dirección de propagación de la onda, $\theta = 0$ en la ecuación 6, (fuerza repulsiva), o si esta línea es perpendicular a la dirección de propagación, $\theta = 90$ en la ecuación 6 (fuerza atractiva) [41].

V. EFECTOS A NIVEL CELULAR

Los campos acústicos en el rango de los ultrasonidos han sido ampliamente usados en el mundo durante más de medio siglo como herramienta para generar imágenes diagnósticas, sin evidenciarse durante este tiempo efectos adversos aparentes en humanos asociados con su uso rutinario [18].

Sin embargo, aunque en las aplicaciones actuales de manipulación y separación celular, se afirma que no generan daño o efectos adversos debido a que tienen las mismas características de los ultrasonidos empleados en diagnóstico médico, es importante, como asegura Martin Wiklund, notar que los bioefectos generados en el cuerpo humano pueden ser diferentes comparados con los observados en un cultivo celular *in vitro* expuesto al mismo tipo de campo, efectos que, además, pueden variar entre diferentes líneas

celulares. Esto hace de la viabilidad un parámetro difícil de modelar y predecir, que en principio debe ser investigado experimentalmente para cada tipo celular [18].

Por esta razón y para evidenciar el tipo de efectos que se pueden generar en las células de un cultivo *in vitro*, al ser expuestas a un campo acústico en el rango de los ultrasonidos, a continuación se describen resultados experimentales encontrados en estudios de viabilidad de diferentes modelos celulares.

V.1. Glóbulos Rojos:

Yasuda *et al.*, sugieren que para determinar el efecto causado por la exposición de glóbulos rojos a campos acústicos ultrasónicos es necesario estimar la concentración de iones potasio (K^+), hierro (Fe) y de la enzima lactato deshidrogenasa (LDH) liberados por la célula al medio [42], que dan cuenta de alteraciones diferenciales de permeabilidad.

Con este objetivo estos autores prepararon una muestra con 5 ml de sangre tomada de *Cavia porcellus*, a la cual se le agregó 1 % W/V de heparina, solución que posteriormente fue centrifugada a 600 g a 4°C por 10 min con el propósito de separar eritrocitos. Después de separados, fueron lavados tres veces con solución fisiológica (0,9 % NaCl, 20 mM Tris-HCl, $pH = 7,4$) y por último se recuperaron y resuspendieron en solución salina a un hematocrito de 3,3 % [42].

Posteriormente se introdujeron 300 μl de la muestra en un dispositivo acústico para exponer estas células a una onda ultrasónica con una frecuencia de 500 kHz, la cual fue elegida con la intención de establecer al interior del dispositivo $\lambda/2$ y así tener un nodo de presión en la mitad de su espesor. Se observó que los glóbulos rojos migraban hacia el nodo de presión de la onda, cambiando su distribución espacial con el tiempo, al usar una onda acústica estacionaria de amplitud igual a $180V_{pp}$ con una densidad de energía acústica de $12,8\text{ mJ}/\text{m}^3$, [42].

Después de irradiar la muestra con la energía acústica, se removieron los eritrocitos del dispositivo para medir el porcentaje de liberación de iones K^+ , Fe y la enzima LDH. La medición se hizo al comparar el porcentaje de liberación de éstos, en la muestra recuperada, con el porcentaje de liberación obtenido en células no expuestas a ultrasonidos o lisadas por su exposición a energía acústica. El procedimiento anterior fue realizado para cuatro muestras expuestas durante diferentes tiempos y energía acústica.

Para eritrocitos sometidos a $12,8\text{ mJ}/\text{m}^3$ durante 2,5 min, Yasuda *et al.*, encontraron que el porcentaje de liberación de iones y enzima es menor al observado en la muestra lisada, pero mayor al de eritrocitos no expuestos a ultrasonidos, incremento que puede ser causado por la presión ejercida por el campo acústico.

Por otro lado para una muestra expuesta a $3,2\text{ mJ}/\text{m}^3$ por un período de 10 min, estos autores determinaron que el

porcentaje de liberación de iones y enzima es mayor que el registrado con eritrocitos no expuestos a ultrasonidos, diferencia que puede ser explicada por el cambio en la temperatura de la muestra, inducido por los ultrasonidos.

Por último, en el caso de una muestra sometida $12,8 \text{ mJ}/\text{m}^3$ durante $2,5 \text{ min}$ pero con presencia de cavitación, se observó que el porcentaje de liberación de iones y enzima es comparable al obtenido en la muestra lisada, indicando que las condiciones inducidas por la cavitación rompen la membrana celular.

Estos resultados sugieren que la fuerza de radiación acústica es eficaz para concentrar eritrocitos sin daño notable en condiciones libres del efecto de cavitación [42].

V.2. Células del Sistema Nervioso:

Bocchi *et al.*, aseguran que los ultrasonidos empleados actualmente en diagnóstico médico pueden generar efectos positivos en diferenciación celular, morfología y conectividad de células en el sistema nervioso central (SNC) que ha sido alterado por enfermedades neurodegenerativas [20].

Para evaluar los efectos del campo acústico en la morfología e interacción entre neuronas y células microgliales, estos autores realizaron valoración por microscopía de contraste de fases de muestras sometidas a ultrasonidos; adicionalmente construyeron un algoritmo en Matlab que permitió desarrollar un método automatizado para el análisis de las imágenes obtenidas [20].

En este estudio se usaron las líneas celulares SH-SY5Y de neurona humana y BV 2 de microglia de ratón, las cuales fueron mantenidas en DMEM/Hams F12 y RPMI 1640, respectivamente, suplementados con 10% de suero fetal bovino (SFB) y 2 mM de L-glutamina a 37°C y 5% de CO_2 .

Para las pruebas acústicas se usaron cinco cajas de Petri por cada línea celular, las cuales fueron mantenidas en medio sin SFB 24 horas antes del tratamiento que fue retirado completamente y la parte posterior del fondo de la caja cubierta con gel transmisor; luego cada caja fue tratada por tres minutos con ultrasonidos de 12 MHz . El tiempo de exposición y frecuencia se eligieron por su similitud con los valores usados convencionalmente en tratamientos ultrasónicos de diagnóstico. Las muestras que se usaron como control fueron sometidas al mismo procedimiento, sin ser expuestas a ultrasonidos, manteniéndose fuera de la incubadora, sin medio y boca abajo durante el tiempo de exposición de las otras muestras [20].

Antes de hacer el análisis morfológico Bocchi *et al.*, determinaron, por densidad óptica, si el campo acústico usado afectaba la proliferación de las líneas celulares SH-SY5Y y BV 2, encontrando que decrece significativamente después del tratamiento con ultrasonidos comparada con la de células control [20].

Al valorar por microscopía las redes generadas por neuronas sometidas al tratamiento ultrasónico, se encontró incremento

en el número y longitud de las prolongaciones, efecto que generó redes más complejas e intrincadas comparadas con las formadas por células no expuestas. Por otro lado, en la línea celular BV 2 donde la forma se asocia con su función se encuentran células redondeadas cuya función es remover desechos del medio, ameboides que se comportan como un macrófago activo y por último células con prolongaciones muy alargadas que son inactivas. Se observó, después de su exposición a ultrasonidos, que se presentaba disminución significativa en el número de células de forma redonda, mientras que el número de células con prolongaciones largas del cuerpo celular aumentó [20].

Adicionalmente el algoritmo diseñado permitió establecer la morfología de estas poblaciones celulares que se caracterizan por generar redes complejas, evidenciando, con este sistema, que número y longitud de las elongaciones en neuronas y células microgliales incrementó después del tratamiento con ultrasonidos [20].

V.3. Levaduras:

Radel *et al.*, a partir de la suposición que las tecnologías de inmovilización, como las técnicas de manipulación celular con campos acústicos en el rango de los ultrasonidos, incrementan la tolerancia a estrés ambiental generado en levaduras durante la fabricación de cerveza, investigaron el efecto en la viabilidad de estas células al ser expuestas a ondas estacionarias de $2,2 \text{ MHz}$ con una potencia de 14 W [23].

Para esto, se cultivó la cepa NCYC 1006 de *S. cerevisiae* a 30°C durante 24 h con una concentración de $3,4 \times 10^7 \text{ cel/ml}$, cultivo que posteriormente fue centrifugado a 3800 rpm por 10 min y resuspendido en 100 ml de solución salina ($0,9 \text{ g NaCl}$ en $100 \text{ ml H}_2\text{O}$).

En la determinación, Radel *et al.*, emplearon medio sin o con etanol a una concentración de 12% (Vol/Vol). Este último fue usado con el propósito de estudiar el efecto de productos de la fermentación en la viabilidad de las levaduras. Luego, se tomaron 64 ml de cada medio y se sometieron a un campo acústico estacionario al introducir este volumen de solución en una cámara de sonicación. Después de realizado el tratamiento ultrasónico, se recuperaron las levaduras y se midió el porcentaje de muerte celular por tinción con azul de metileno y se analizaron cambios morfológicos mediante microscopía electrónica de transmisión (TEM) [23].

De los experimentos realizados se encontró, en el caso del medio sin etanol, primero que al someter las levaduras al tratamiento ultrasónico estas se ubicaban en diferentes niveles asociados con los planos nodales de la onda estacionaria, efecto generado por la acción de la componente axial de la fuerza primaria de radiación acústica, 4, y segundo que las células se agregaban en distintas regiones de los planos nodales, debido al efecto de la componente lateral de la fuerza primaria de radiación acústica y a la acción de las fuerzas de Bjerkness, 6. Zonas estas donde se establece que la amplitud de presión es baja, 2 [23].

Sin embargo, por microscopía electrónica se evidenciaron

alteraciones en la integridad de vacuolas al interior de las levaduras, mientras que su núcleo y membrana celular no eran aparentemente afectados, daño que según Radel y colaboradores no es significativo pero que comprometería parcialmente el proceso de división celular [23].

Por otro lado en presencia de etanol a una concentración de 12%(Vol/Vol), se observó que la viabilidad celular disminuía [23]. La presencia de etanol en el medio podría estar ubicando las levaduras en regiones internodales, con lo cual las células son expuestas a amplitudes de presión más elevadas, ecuación 2.

Para terminar es importante resaltar que según Radel *et al.*, los resultados encontrados están de acuerdo con evidencia previa que sugiere que el daño causado a las células está directamente relacionado con el efecto de la presión sobre estas [23].

V.4. Células Vegetales:

Bohm *et al.*, afirman que hay poca atención en el estudio de estos efectos en plantas, investigaciones que son importantes en aplicaciones biotecnológicas tales como sistemas ultrasónicos de filtración o agitación, porque al considerar la viabilidad de estas células como una función del tipo de onda (viajera o estacionaria), de la frecuencia, el tiempo de exposición al campo y de la densidad de energía, se puede manipular los ultrasonidos con mayor eficiencia en estas aplicaciones [24].

Entonces, para evaluar el efecto en la viabilidad celular generado por ondas ultrasónicas, estos autores usaron cultivos *in vitro* de *Petunia hybrida* que fueron mantenidos durante 7 días en medio líquido UM a 24 ± 2^0 C. Si bien las células en cultivo tenían un diámetro entre $60 - 80 \mu m$, como resultado de la división celular tendían a formar colonias de aproximadamente 10 células que fueron filtradas para reducir efectos de apantallamiento y permitir el conteo celular por microscopía [24].

El tratamiento ultrasónico de los cultivos de *P. hybridase* llevó acabo en dos cámaras diferentes, dependiendo si la onda ultrasónica a usar era estacionaria o viajera, en donde se introducía una suspensión de células con una concentración $1,2 \times 10^4$ cel/ml que era expuesta a frecuencias entre $2 - 2,5$ MHz durante un tiempo máximo de 40 min. Después los cultivos fueron recuperados para medir captación de diacetato de fluoresceína (FDA), identificando, además, que parámetros como densidad de energía acústica, tipo de onda y días de cultivo afectaban la viabilidad celular [24].

Para evidenciar el efecto de la energía acústica Bohm *et al.*, expusieron células de *P. hybrida* a una onda estacionaria de 2,43 MHz y posteriormente variaron la densidad de energía desde 0 J/m³ hasta 70 J/m³, observando que la viabilidad cambia poco cuando las células son expuestas a una energía de 25 J/m³. Sin embargo, para energías más altas tales como 44 J/m³ y 70 J/m³ la viabilidad decrece a 60% y 20% respectivamente después de 40 min de exposición, cambios que pueden estar asociados con el aumento de la presión.

Al determinar el efecto en la viabilidad generado por el tipo de campo acústico, estos autores expusieron células a ondas estacionarias y viajeras con densidad de energía de $8,5$ J/m³ y una frecuencia de $2,15$ MHz, lo cual generó amplitudes de presión máximas de $0,28$ MPa en las ondas estacionarias y $0,2$ MPa en las viajeras, exponiendo las células al mismo valor de energía independiente del tipo de onda. Al comparar los resultados obtenidos usando los dos tipos de ondas con el control, Bohm *et al.*, observaron una rápida disminución en la viabilidad cuando exponían células al campo de una onda viajera, mientras que permanece constante para ondas estacionarias [24].

Este resultado se explica por el hecho de que en un campo de onda viajera las células tienden a distribuirse homogéneamente en todo el fluido, siendo expuestas a diferentes amplitudes de presión y de desplazamiento. Por otro lado, en un campo de onda estacionario las células tienden a moverse, por la acción de la fuerza primaria de radiación acústica, hacia los nodos de la onda dependiendo de su densidad y compresibilidad, posición en la que permanecen durante su exposición al campo acústico estacionario siendo así sometidas a una menor presión (figura 4d). Los resultados encontrados por estos autores evidencian que al incrementar la densidad de energía y el tiempo de exposición a un campo acústico estacionario se disminuye la viabilidad de las células en un cultivo de *P. hybrida* y que adicionalmente el daño puede aumentar dependiendo del tipo de onda aplicada.

VI. EFECTOS A NIVEL MOLECULAR Y ESTRUCTURAL

Cuando se emplea un campo acústico, dependiendo de su frecuencia, tipo de onda o célula y del tiempo de exposición, éste puede generar efectos mecánicos que obligan a cambiar la forma celular. Lo anterior conlleva alteraciones moleculares y estructurales que se traducen en variaciones de elasticidad, tamaño y forma, las cuales, desencadenan desde el interior de la célula una respuesta mecánica que involucra cambios en la regulación de presión y volumen [43], al igual que cambios conformacionales y mecánicos en citoesqueleto.

Para entender por qué se generan estos cambios a nivel molecular y estructural en células de cultivos *in vitro*, expuestas a campos como el acústico donde habrían interacciones de carácter mecánico, es necesario desarrollar modelos físicos que permitan explicar estos efectos. En la actualidad hay muchas aproximaciones y modelos mecánicos para células mamíferas, pero en general se pueden reducir a dos. Uno en la que la célula es vista como un medio continuo, modelos viscoelástico y bifásico, y otro en la que la célula sería un material micro y nano estructurado, modelos citoesqueléticos, para células adherentes, y de redes de espectrina para eritrocitos [44].

VI.1. Modelo Viscoelástico:

Al modelar la célula como un medio continuo, se considera a ésta como un objeto que tiene las mismas propiedades físicas

en todo su espesor, es decir, si es dividida en elementos infinitesimales, cada uno de los cuales tendría las mismas propiedades que el sistema en su totalidad. Por lo tanto, las propiedades locales y globales de la célula son homogéneas, y el comportamiento mecánico estaría gobernado por procesos que se pueden expresar con las ecuaciones de la mecánica en términos de balance de masa, momentum lineal, momentum angular y energía [45].

A pesar de la complejidad de la célula como sistema físico, del poco entendimiento de la dinámica celular y la reacción física de las células a su ambiente [46], a nivel mecánico existe una variedad de técnicas experimentales que han mostrado la reacción de las células a una fuerza mecánica [47, 59], evidenciándose por una parte su carácter elástico dada su capacidad de reaccionar a una fuerza mecánica deformándose en proporción con el esfuerzo pero volviendo a su forma original una vez la fuerza es removida y, su carácter viscoso debido a que ante un aumento en el esfuerzo es posible que la célula se deforme permanentemente, de manera que la célula puede tratarse como un material viscoelástico [49].

Desde el punto de vista de la mecánica la reacción de una célula, material viscoelástico, a una fuerza es abordable desde la tercera ley de Newton, pares de acción-reacción (figura 4), y mediante la ley de Hooke [50], que puede sintetizarse en la forma

$$\sigma = E\varepsilon. \quad (7)$$

Donde σ es la fuerza por unidad de área o esfuerzo, ε es la deformación, que se entiende como la medida cuantitativa del cambio de forma del material y E el módulo de elasticidad asociado con las propiedades elásticas del material.

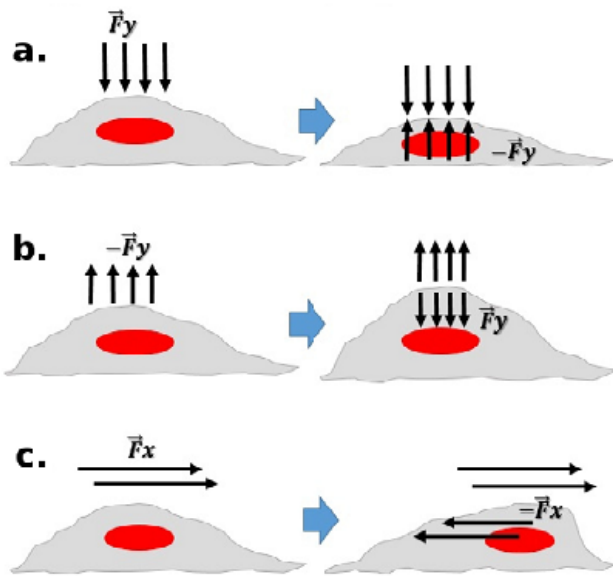


Figura 4. Modelo viscoelástico para la célula. a. Deformación por compresión b. Deformación por tensión. c. Deformación por cizallamiento.

Así, dependiendo de la dirección y magnitud de la fuerza aplicada (acción), se generaría una deformación (reacción) en

la célula, la cual puede estar asociada con una compresión, si la fuerza se aplica perpendicularmente a la superficie de la célula en dirección a su interior (figura 4a), con una tensión, cuando la fuerza se aplica perpendicularmente a la superficie de la célula en dirección hacia su exterior (figura 4b), o con un cizallamiento, si la fuerza se aplica paralelamente a la superficie de la célula (figura 4c).

Estas descripciones son útiles al ofrecer una relación entre la deformabilidad mecánica y el potencial metastásico en células cancerígenas, donde la elasticidad es un fenotipo que puede estar asociado con la sobreexpresión de genes involucrados en motilidad, lo que puede ser útil para fines terapéuticos [51]. Sin embargo, si se quiere entender la reacción interna de la célula a un campo de fuerzas, como el acústico, es necesario realizar una descripción de la mecánica de los componentes internos de ésta.

Modelo Citoesquelético:

Albrecht-Buehler en 1987 reportó que el primer componente que soporta la acción de fuerzas mecánicas se encuentra bajo la membrana celular y es el citoesqueleto [52], el cual está formado por una red de biopolímeros cruzados y superpuestos que generan una malla o red, donde el comportamiento mecánico de ésta estructura en conjunto depende del comportamiento mecánico de sus constituyentes individuales: microfilamentos de actina [53], microtúbulos [54] y filamentos intermedios [55], elementos que están unidos por nodos proteicos de filamina y actina [56], donde dependiendo del espacio entre bandas y la distancia entre nodos se construirá un armazón, que le permite a la célula tolerar deformaciones, transmitir esfuerzos y dirigir cambios de forma [57].

Así existen modelos donde se afirma que al imponer un esfuerzo sobre una célula, éste se distribuirá homogéneamente y será soportado solamente por la corteza celular, logrando descripciones mecánicas de las viscosidades y tensiones corticales en granulocitos sanguíneos [58], citoplasma de neutrófilos [59], y membrana de células endoteliales y leucocitos [60], sin una relación marcada con cambios en su estructura interna.

Según lo afirmado por Ingber y Folkman en 1989, si se quiere explicar cómo la célula regula su comportamiento ante un estímulo mecánico es útil alejarse del supuesto de ésta y su citoesqueleto como materiales continuos, para postular modelos que incluyan la microestructura intracelular, relacionando su comportamiento mecánico con cambios químicos que afectan el comportamiento molecular [61], y así modelarla matemáticamente, basándose en un principio arquitectónico propuesto por Fuller en 1961 llamado integridad tensional [62].

Este principio permite generar un modelo en el que un sistema cualquiera puede describirse a partir de tensiones y compresiones, donde barras rígidas son las responsables de generar compresiones y cuerdas elásticas de generar tensiones. En el caso de la célula, según Ingber y Donald, bajo el modelo de tensegridad las estructuras que asumen las fuerzas de tensión son microfilamentos y filamentos

intermedios, siendo las fuerzas de tensión balanceadas por elementos estructurales interconectados que resisten compresión, papel que cumplen microtúbulos y matriz extracelular [63].

En investigaciones recientes para explicar la mecánica de adhesión y la respuesta celular ante la aplicación de una fuerza externa Walcott *et al.* emplean un modelo de citoesqueleto que incorpora dentro de su desarrollo elementos propios de la estructura celular, incluyendo interacción entre microfilamentos de actina por proteínas de ligación y complejos de adhesión mediante sistemas masaresorte, logrando la solución de una ecuación diferencial, que hace posible un análisis de distribución de probabilidad de enlaces, rupturas y tasas de giro de proteínas en función de un tiempo característico, que depende de la longitud de filamentos de actina, de la fricción interna y de la magnitud de la fuerza aplicada en la célula [64].

A nivel de aplicación, entender la dinámica del citoesqueleto ante cambios mecánicos impuestos en el ambiente es de importancia a nivel celular. Por ejemplo en los estudios de Engler *et al.*, se realiza un seguimiento de la viabilidad de células madre, variando parámetros del ambiente mecánico, como el módulo elástico del sustrato en el que las células se encuentran adheridas [65].

En este estudio se muestra que la diferenciación de estas células depende de la rigidez que sensan del sustrato en el que se encuentran, donde las adheridas a superficies rígidas (20–45 kPa) se transforman en osteocitos, las que se adhieren en superficies suaves se transforman en células cerebrales primarias (0,1 – 1 kPa), y las adheridas en superficies intermedias se transforman en miocitos (8 – 10 kPa), lo que indica que señales mecánicas tienen significado fisiológico y determinan el destino de diferenciación celular [65]. En otras palabras, la célula tiene mecanismos que le permiten sentir fuerzas mecánicas, como las asociadas al campo acústico, y generar respuestas acorde con la magnitud de éstas.

VII. CONCLUSIONES

En la aplicación de ultrasonidos para el desarrollo de nuevas tecnologías de manipulación y separación celular, es importante identificar los efectos físicos y biológicos causados por el campo acústico sobre las células, con el objetivo de optimizar su uso en estas aplicaciones. Entre los efectos físicos observados, al exponer células de un cultivo *in vitro* a un campo acústico, según se mencionó, se encuentran (i) la cavitación asociada con el cambio de temperatura y presión del medio, (ii) el aumento de temperatura del medio debido a la disipación de energía de la onda y (iii) los efectos asociados con las fuerzas F_{prm} y F_{sec} que pueden ser afectados por productos obtenidos en procesos biológicos, los cuales cambian las propiedades físicas del medio de cultivo, como su densidad y compresibilidad, generando cambios en la intensidad de las fuerzas, sometiendo a las células a diferentes valores de presión alterando su viabilidad.

La acción e intensidad de estos efectos físicos se relaciona con el tiempo de exposición al campo y las características de

la onda usada, tipo de onda, frecuencia y amplitud, efectos que pueden ser adversos o positivos dependiendo de la línea celular.

Por otro lado los efectos físicos pueden generar efectos biológicos que se evidencian a nivel molecular, por ejemplo, el cambio en la temperatura del medio puede afectar procesos de transcripción y traducción en la célula, efecto que se evidencia con la disminución en la proliferación celular y el cambio en la morfología de las células asociada con sus estados funcionales.

VIII. AGRADECIMIENTOS

Al Departamento Administrativo de Ciencia, Tecnología e Innovación Colciencias por su apoyo con los proyectos Uso de levitación acústica para separación y clasificación de células infectadas con *Leishmania* Plasmodium, ECOS NORD Francia convocatoria No. 533 de 2011 y Sistemas de separación y clasificación celular en corto tiempo, con bajo costo y alta eficiencia: uso de levitación acústica y fuerzas hidrodinámicas, convocatoria 569 de 2012, código 222856933541.

REFERENCIAS

- [1] Hartono, D., Liu, Y., Tan, P. L., Then, X. Y., Yung, L. L., and Lim, K. On-chip measurements of cell compressibility via acoustic radiation. *Lab Chip*, 11(23), 4072, 2011.
- [2] Barnkob R., Augustsson P., Magnusson C., Lilja H., Laurell T. and Bruus H. Measuring density and compressibility of white blood cells and prostate cancer cells by microchannel acoustophoresis. 5th International Conference on Miniaturized Systems for Chemistry and Life Sciences October 2-6, 2011, Seattle, Washington, USA.
- [3] Weiser M. A. H and Apfel R. Extension of acoustic levitation to include the study of micronsize particles in a more compressible host liquid. *J. Acoust. Soc. Am.* 71(5), May 1982.
- [4] Shields, C. Wyatt, Catherine D. Reyes, and Gabriel P. Lpez. Microfluidic Cell Sorting: A Review of the Advances in the Separation of Cells from Debulking to Rare Cell Isolation. *Lab on a chip* 15.5 (2015): 12301249. PMC. Web. 25 Apr. 2016
- [5] Barnkob R. and Bruss H. Acoustofluidics in microsystems: investigation of resonances. Department of Micro and Nano-technology, Technical University of Denmark, 2009, Master Thesis, June.
- [6] Narayanan N., Saldanha A. and Gale B. K. A microfabricated electrical SPLITT system. *Lab Chip*, 6, 105-114. (2006).
- [7] Thayne L. E. Microfabricated Acoustic and Thermal Field-9 Flow Fractionation Systems. Georgia Institute of Technology, 2005, Doctor Thesis, May.
- [8] Chianéa, T. Sedimentation field-flow-fractionation: Emergence of a new cell separation methodology. *Talanta*, 51(5), 835-847.(2000).

- [9] Wahlund KG and Nilsson L. Flow FFFBasics and key applications. In: Williams SKR, Caldwell KD (eds) Field-flow fractionation in biopolymer analysis. (Springer, Vienna (2012)).
- [10] Reschiglian, P., Zattoni, A., Roda, B., Michelini, E., and Roda, A. Field-flow fractionation and biotechnology. *Trends in Biotechnology*, 23(9), 475-483. (2005).
- [11] Liu, Y., and Lim, K. Particle separation in microfluidics using a switching ultrasonic field. *Lab on a Chip*, 11(18), 3167. (2011).
- [12] Gupta, S., Feke, D. L., and Manas-Zloczower, I. Fractionation of mixed particulate solids according to compressibility using ultrasonic standing wave fields. *Chemical Engineering Science*, 50(20), 3275-3284. (1995).
- [13] Kumar, M., Feke, D. L., and Belovich, J. M. Fractionation of cell mixtures using acoustic and laminar flow fields. *Biotechnol. Bioeng. Biotechnology and Bioengineering*, 89(2), 129-137. (2004)
- [14] Petersson, F., Nilsson, A., Holm, C., Jansson, H., and Laurell, T. Continuous separation of lipid particles from erythrocytes by means of laminar flow and acoustic standing wave forces. *Lab Chip*, 5(1), 20-22. (2005).
- [15] Bruss Henrik. Acoustofluidics 1: Governing equations in microfluidics. *Lab Chip*, 11, 3742. (2011).
- [16] Guo F, Li P, French J, Mao Z, Zhao H, Li S, Nama N, Fick J, Benkovic S and Huang T. J. Controlling cell-cell interactions using surface acoustic waves. *PNAS*. Vol. 112, no. 1, 4348, January. (2015).
- [17] Ding X., Lin S., Kiraly B., Yue H., Li S., Chiang Ikao., Shi J., Benkovic S. J. and Huang T. J. On-chip manipulation of single microparticles, cells, and organisms using surface acoustic waves. *PNAS*. Vol. 109, no. 28, 1110511109, (2012).
- [18] Wiklund, Martin. Acoustofluidics 12: Biocompatibility and cell viability in microfluidic acoustic resonators. *Lab on a Chip*, April, 2012.
- [19] Li, Peng, Mao, Zhangming, Peng, Zhangli, Zhou, Lanlan, Chen, Yuchao, Huang, PoHsun, Truica, Cristina I., Drabick, Joseph J., El-Deiry, Wafik S., Dao, Ming, Suresh, Subra, and Huang, Tony. Acoustic separation of circulating tumor cells. *PNAS*, 112 (16) Jun, 2015.
- [20] Bocchi, Leonardo, Branca, Jacopo J.V., Pacini, Stefania, Cosentino, Angela, Morucci, Gabriele, and Ruggiero, Marco. Effect of ultrasounds on neurons and microglia: Cell viability and automatic analysis of cell morphology. *Biomedical Signal Processing and Control*, 22, 4453. (2015).
- [21] Hultstrom, J. H, Manneberg, O. M, Dopf, K. D, Hertz, H. M. H, Brismar, H. B, and Wiklund, M. W. Proliferation and viability of adherent cells manipulated by standing wave ultrasound in a micro fluidic chip. *Ultrasound in Medicine and Biology*, 33(13). (2007).
- [22] Wang, Pan, Li, Yixiang, Wang, Xiaobing, Guo, Ling, MS, Xiaomin Su, and Liu, Quanhong. Membrane Damage Effect of Continuous Wave Ultrasound on K562 Human Leukemia Cells. *J Ultrasound Med*, 31(12), 1977-1986. (2012).
- [23] Radel, S., McLoughlin, A.J., Gherardini, L., Doblho Dier, O., and Benes, E. Viability of yeast cells in well controlled propagating and standing ultrasonic plane waves. *Ultrasonics*, 38, 633-637. 2000.
- [24] Bohm, H., Anthony, P., Davey, M.R., Briarty, L.G., Power, J.B., Lowe, K.C., Benes, E., and Grschl, M. Viability of plant cell suspensions exposed to homogeneous ultrasonic fields of different energy density and wave type. *Ultrasonics*, 38. (2000).
- [25] Chisti Y. Sonobioreactors: using ultrasound for enhanced microbial productivity. *TRENDS in Biotechnology*. Vol.21 No.2 (2003).
- [26] Schlafer O., Sievers M., Klotzbucher H., and Onyeché T. I. Improvement of biological activity by low energy ultrasound assisted bioreactors. *Ultrasonics*, 38, 711-716. (2000).
- [27] Guo F, Mao Z, Chen Y, Xie Z, Lata J. P, Li P, Ren L, Liu J, Yang J, Dao M, Suresh S and Huang T. J. Three-dimensional manipulation of single cells using surface acoustic waves. *PNAS*, 113, 6, 9, 2016.
- [28] Li S., Glynne-Jones P., Andriotis O. G., Ching K. Y, Jonnaladagda, Oreffo R. O. C., Hill M. and Tare R. S. Application of an acoustofluidic perfusion bioreactor for cartilage tissue engineering. *Lab Chip*, 14, 4475-4485. (2014).
- [29] Hawkes, J.J., Limaye, M.S., and Coakley, W.T. Filtration of bacteria and yeast by ultrasound-enhanced sedimentation. *Journal of Applied Microbiology*, 82, 39-47. (1997).
- [30] Sadikova D. G. and Pashovkin T. N. Cell Concentration and Separation in the Field of a Standing Ultrasonic Wave for Medicine and Biotechnology. *Open Journal of Biophysics*, 2013, 3, 70-75.
- [31] Landau L. D. and Lifshitz E. M. *Mecánica de fluidos Vol 6 curso de física teórica*. (Editorial Reverté, S. A. España 1985).
- [32] Yasuda K., Kiyama M. and Umemura S. Deoxyribonucleic acid concentration using acoustic radiation force. *J. Acoust. Soc. Am.* 99 (2), February, 1996.
- [33] Repacholi M. H., Grandolfo M. and Rindi A. *Ultrasound: medical applications, biological effects, and hazard potential*. (Plenum Press-New York and London. 1985).
- [34] Azar L. *Cavitation in Ultrasonic Cleaning and Cell Disruption. Controlled Environments*. February, 2009. www.cemag.us.
- [35] Hill C. R., Bamber J. C. and ter Haar G. R. *Physical Principles of Medical Ultrasonics Second Edition*. (John Wiley & Sons, Ltd. 2004).
- [36] Laurell T. and Lenshof A. *Microscale Acoustofluidics*. The Royal Society of Chemistry. 2015.
- [37] Gor'kov, L. P. On the Forces Acting on a Small Particle in an Acoustical Field in an Ideal Fluid. *Soviet Physics Doklady*, Vol. 6, p.773. (1962).
- [38] Ding X., Peng Z., Lin S. Sz-Chin, Geri M., Li S., Li P., Chen Y., Dao M., Suresh S. and Huang T. J. Cell separation using tilted-angle standing surface acoustic waves. Supporting Information. *PNAS Early Edition*.

- [39] Perales F. and González I. On the Force Acting in Micro-manipulation of Particles at Low Frequencies. IEEE Ultrasonics Symposium. 2005.
- [40] Laurell T., Petersson F. and Nilsson A. Chip integrated strategies for acoustic separation and manipulation of cells and particles. Chem. Soc. Rev., 2007, 36, 492506.
- [41] Haar G. T. and Wyard S. J. Blood Cell Banding in Ultrasonic Standing Wave Fields: A Physical Analysis. Ultrasound in Med. & Biol., Vol. 4, pp. 111-12. (1978).
- [42] Yasuda, Kenji, Haupt, Stephan Shuichi and Umemura, Shinichiro. Using acoustic radiation force as a concentration method for erythrocytes. J. Acoust. Soc. Am, 102(12). 1997.
- [43] Jiang Hongyuan, Sean X. Sun, Cellular Pressure and Volume Regulation and Implications for Cell Mechanics Biophysical Journal Volume 105, Issue 3, 6 2013.
- [44] Lim C.T, Zhou E.H and Quek S.T. Mechanical models for living cells, review, Journal of Biomechanics 39 (2006) 195216.
- [45] Stamenović Dimitrije and Wang Ning. Stress Transmission within the Cell, Compr Physiol. 1(1), 499524, 2011.
- [46] Wolgemuth Charles W. Trend: Does cell biology need physicists?, Physics, American Physical Society, 2011. doi: 10.1103/Physics.4.4.
- [47] Sato M., Theret D.P., Wheeler L.T., Ohshima N. and Nerem R.M. Application of the micropipette technique to the measurement of cultured porcine aortic endothelial cell viscoelastic properties. Journal of Biomechanical Engineering 112, 263-268, 1990.
- [48] Dong C. and Skalak R. Leukocyte deformability: finite element modeling of large viscoelastic deformation. Journal of Theoretical Biology 158 (2), 173193, 1992.
- [49] Kasza Karen E, Rowat Amy C, Jiayu Liu, Angelini T. E., Brangwynne C. P., Koenderink G. H. and Weitz D. A. The cell as a material, Current Opinion in Cell Biology, 19:101107, 2007.
- [50] Heidemann Steven and Wirtz Denis. Towards a regional approach to cell mechanics, trends in Cell Biology Vol.14 No.4 2004.
- [51] Zhang Weiji, Kaid Kazuharu, Choi Dong Soon, Iwamoto Takayuki, Nguyen Yen H., Wong Helen and Landis Melissa. Microfluidics separation reveals the stem-celllike deformability of tumor-initiating cells, Ueno Naoto T., Chang Jenny, Qina Lidong, PNAS, vol. 109, no. 46 — 1871 (2012).
- [52] Albrecht-Buehler, G. Role of cortical tension in broblast shape and movement, Cell Motil. Cytoskeleton 7, 54-67, 1987
- [53] Gardel M.L., Nakamura F., Hartwig J.H., Crocker J.C., Stossel T.P. and Weitz D.A. Prestressed F-actin networks cross-linked by hinged filamins replicate mechanical properties of cells, Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. 103 (2006) 17621767.
- [54] Gittes F, Mickey B., Nettleton J. and Howard J. Flexural rigidity of microtubules and actin filaments measured from thermal fluctuations in shape, J. Cell Biol. 120 (1993) 923934.
- [55] Koster S., Weitz D.A., Goldman R.D., Aebi U. and Herrmann H. Intermediate filament mechanics *in vitro* and in the cell: from coiled coils to filaments, fibers and networks, Curr. Opin. Cell Biol. 32C (2015) 8291.
- [56] Janmey Paul A. and Weitz David. Dealing with mechanics: mechanisms of force transduction in cells, trends in Biochemical Sciences Vol.29 No.7 July 2004.
- [57] Fletcher Daniel A, Mullins Dyché. Cell mechanics and the cytoskeleton, Nature Vol 463, 28 (2010).
- [58] Evans E. and Yeung A. Apparent viscosity and cortical tension of blood granulocytes determined by micropipet aspiration. Biophys. J. 56, 151-160, 1989.
- [59] Dong C., Skalak, R. and Sung K. L. Cytoplasmic rheology of passive neutrophils. Biorheology 28, 557-567, 1991.
- [60] Schonbein Schmid, G. W., Kosawada, T., Skalak, T. and Chien, S. Membrane model of endothelial cell and leukocytes. A proposal for the origin of cortical stress. ASME J. Biomech. Eng. 117, 171-178, 1995.
- [61] Ingber, D.E. and Folkman, J. Tension and compression as basic determinants of cell form and function: utilization of a cellular tensegrity mechanism. In Cell Shape: Determinants, Regulation and Regulatory Role (ed. Stein, W. and Bronner, F.), (Academic Press: Orlando, 1989).
- [62] Fuller B. Tensegrity. Portfolio Artnews Annual 4, 112-127, 1961.
- [63] Ingber and Donald E. Tensegrity I. Cell structure and hierarchical systems biology Journal of Cell Science 116 (7), 2003.
- [64] Walcott Sam A, Suna X. Mechanical model of actin stress fiber formation and substrate elasticity sensing in adherent cells. PNAS, vol. 107 , no. 17, 77577762, (2010).
- [65] Engler J. Adam, Sen Shamik, Sweeney Lee and Discher E. Dennis, Matrix Elasticity Directs Stem Cell Lineage Specification, Cell 126, 677689, (2006).

PREMIO NOBEL DE FÍSICA DE 2016: EFECTO HALL CUÁNTICO Y AISLANTES TOPOLÓGICOS

THE 2016 NOBEL PRIZE IN PHYSICS: QUANTUM HALL EFFECT AND TOPOLOGICAL INSULATORS

OSVALDO DE MELO

Facultad de Física, Universidad de La Habana; omelo@fisica.uh.cu
† autor para la correspondencia

Received 28/10/2016; Accepted 28/11/2016

Se describen algunos aspectos esenciales de dos fenómenos relacionados con el Premio Nobel de Física de 2016: el efecto Hall cuántico y los aislantes topológicos. Entre estos aspectos destacan: i) la importancia de la topología para la explicación de la estabilidad de la constante de Klitzing obtenida a partir del efecto Hall cuántico; ii) las propiedades fundamentales de los aislantes topológicos y iii) algunos aspectos de la topología de la estructura de bandas que permiten identificar candidatos de aislantes topológicos.

Essential topics of two phenomena related with the 2016 Nobel Prize in Physics are described: the quantum Hall effect and topological insulators. In particular: i) the importance of topology to explain the stability of the Klitzing constant obtained from the quantum Hall effect; ii) fundamental properties of topological insulators and iii) some aspects of band structure topology that allow us to identify topological insulator candidates.

PACS: Palabras clave. 01.65.+g History of science, 01.85.+f Careers in physics and science, 01.75.+m Science and society

I INTRODUCCIÓN

El premio Nobel de Física de 2016, fue entregado el lunes 3 de octubre a David J. Thouless (Universidad de Washington, Seattle, EUA), F. Duncan M. Haldane (Universidad de Princeton New Jersey, EUA) y J. Michael Kosterlitz (Universidad de Brown, Providence, EUA) (ver Fig. 1) “por descubrimientos teóricos de transiciones de fase topológicas y fases topológicas en la materia”.

Hasta el momento, la teoría desarrollada por los premiados ha abarcado fenómenos como la superconductividad, la superfluidez y algunos problemas relacionados con el magnetismo. Pero probablemente una de las aplicaciones más espectaculares es la predicción y posterior obtención de un nuevo tipo de materiales llamados aislantes topológicos (AT). Con múltiples aplicaciones potenciales que van desde la computación topológica hasta la espintrónica, estos materiales son, de alguna manera, una de las secuelas más importantes del efecto Hall cuántico (EHC) como veremos a lo largo de este trabajo.

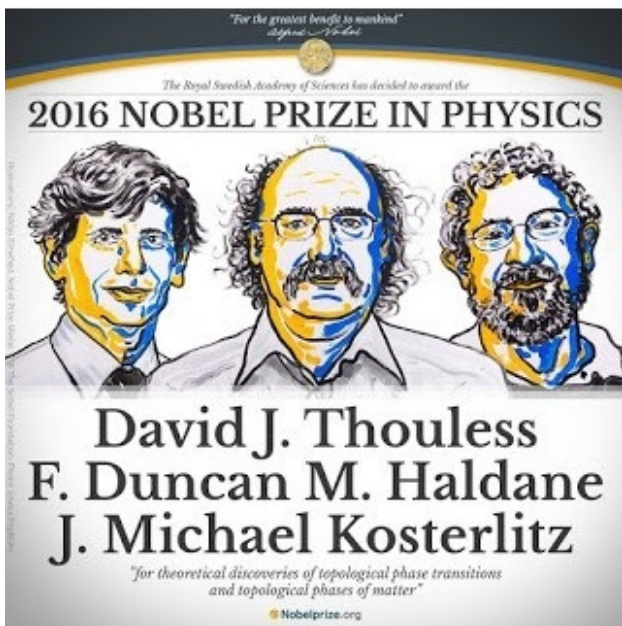


Figura 1. Los ganadores del premio Nobel de Física 2016.

II ALGUNOS CONCEPTOS DE TOPOLOGÍA

¿Son diferentes un círculo y un triángulo? Cualquiera con mínimos conocimientos de geometría (incluso sin ellos) diría inmediatamente que sí, que obviamente un círculo y un triángulo son muy diferentes. Sin embargo, en el marco de la topología matemática los dos pertenecen a la misma categoría. Esto se debe a que en esta rama de la ciencia se consideran equivalentes aquellos objetos que puedan transformarse uno en el otro de forma “suave” ya sea deformando, doblando, torciendo, pero no cortando ni pegando partes separadas. Y evidentemente, un triángulo se puede construir deformando un círculo, por ejemplo estirándolo por tres puntos equidistantes.

Una circunferencia no pertenece a la misma categoría que un segmento, porque para hacer el segmento habría que cortar la circunferencia en algún punto, además de estirarla. Una esfera maciza y un plato pertenecen a la misma clase de objeto, topológicamente hablando, porque deformando la esfera se puede construir un plato. Pero un pan redondo

y una rosquita (toroide) no pertenecen a la misma categoría, porque deformando el pan no se puede obtener una rosquita, habría que abrirle un orificio en el medio, o sea, habría que cortar. Por otra parte, una rosquita es la misma cosa (topológicamente hablando) que una taza, porque el asa tiene un agujero y deformando la rosquita se puede obtener la taza (o al revés) sin cortar ni pegar nada (ver Fig. 2). A su vez, la taza es diferente a un buñuelo, que tiene dos agujeros y que vendría a tener el mismo carácter topológico que unos espejuelos.



Figura 2. Una taza se puede convertir en una rosquita solo deformándola, sin cortar ni pegar nada. Por eso ambas pertenecen a la misma categoría topológica.

De lo anterior se desprende que la topología tiene que ver con la forma, aunque no es la forma, y que objetos con aspectos muy diferentes pueden ser equivalentes de acuerdo a su topología. El tipo de topología que posee un ente cualquiera le otorga ciertas propiedades. Y esas propiedades que dependen de la topología no pueden modificarse por transformaciones suaves, por eso se dice que son propiedades robustas que están “protegidas” por la topología.

El tipo de topología se caracteriza por una magnitud llamada invariante topológico que, en el ejemplo anterior, se correspondería con el número de agujeros, al que en topología se llama genus. Así, triángulo, círculo, esfera y plato tienen la misma topología caracterizada por un número de agujeros, genus, igual a cero. La rosquita y la taza tendrían un agujero, y el buñuelo tendría dos. Véase que, de acuerdo con esto, los cambios topológicos ocurren a saltos ya que un objeto puede cambiar de tener un agujero a tener dos o tres, pero no puede tener un agujero y medio, ni un agujero y cuarto. Eso no tendría sentido ya que no existe algo que sea una fracción de agujero.

El número de genus de un determinado objeto puede determinarse matemáticamente por el Teorema de Gauss-Bonnet:

$$g = 1 - \frac{1}{4\pi} \int_S K dA.$$

En el que K representa la curvatura local de la superficie S , dA es el diferencial de área y g es el genus o número de agujeros. Para el caso simple de una esfera con $K = 1/R^2$ es fácil deducir, a partir de este teorema, que el número de genus es 0, lo que corresponde con el hecho de que la esfera no tiene ningún agujero. Un cálculo un poco más complicado resulta en que un torus tendría un genus igual a 1, y así sucesivamente para otros tipos de superficie. Este número caracteriza la topología del objeto y se puede demostrar que si la esfera se deforma para convertirla en, por ejemplo,

un elipsoide de revolución o cualquier otro objeto que no tenga ningún agujero, aun cuando la curvatura local pueda variar de un punto a otro, el genus dado por la integral de la ecuación se mantiene siempre igual a 0.

Las características topológicas no solo se aplican a objetos sencillos como los descritos anteriormente, sino también a entes más complejos como por ejemplo a la estructura de bandas de los sólidos. En estos casos, al igual que los agujeros, existen números que caracterizan el tipo de topología. Y también estos números, que ya no se corresponden con agujeros, varían a saltos y dan lugar a propiedades que no cambian a no ser que cambie la topología.

Los premiados con el Nobel de este año definieron estos saltos como transiciones de fase topológicas. A diferencia de las transiciones de fase tradicionales como la fusión o la vaporización, las transiciones topológicas no van acompañadas de cambios bruscos en las propiedades termodinámicas de la sustancia (densidad, calor específico, entropía, etc.), que en algunos casos se corresponden con determinadas rupturas de la simetría. Por eso, son un nuevo tipo de transición y, las fases topológicas, un nuevo tipo de estado de la materia diferente a los tradicionales sólido, líquido, gaseoso o plasma, con los que estamos tan familiarizados. En eso radica, en gran medida, su importancia: es un punto de vista totalmente diferente de analizar la naturaleza.

III CONDUCTORES Y AISLANTES

El hecho de que algunos materiales, como los metales, pueden conducir la corriente eléctrica mientras que otros, como el vidrio, no, fue reconocido ya desde el siglo XVIII. Sin embargo, la explicación del porqué de las diferencias entre unos y otros tuvo que esperar al surgimiento de la física cuántica, ya bien entrado el siglo XX, con el desarrollo de la “teoría de bandas”.

Los estados electrónicos de un sólido están dispuestos en forma de bandas de energía permitidas separadas por bandas prohibidas que en lo adelante llamaremos “gaps”. Como consecuencia de la simetría de traslación de la red en los cristales, las bandas permitidas representan un cuasi-continuo de estados, caracterizado por un número cuántico que se conoce como momentum del cristal, o cuasi-momentum. Todos los estados electrónicos no equivalentes de un sólido están contenidos en lo que se conoce como primera zona de Brillouin, que no es más que la celda de Wigner-Seitz en el espacio recíproco.

Debido al principio de exclusión de Pauli, las bandas admiten una cantidad de electrones igual al doble del número de estados, considerando la degeneración debida al espín electrónico. De este modo, si el número de electrones que componen un cierto material es tal que justamente “llena” hasta una determinada banda, quedando la siguiente banda vacía y separada por un “gap”, entonces el material se comporta como un aislante o, si el “gap” no es demasiado grande, como un semiconductor. Si la cantidad de electrones

es tal que la última banda no queda llena completamente entonces el material se comporta como un metal.

La forma en que la energía de las bandas depende del vector momentum dentro de la primera zona de Brillouin, es a lo que se llama estructura de bandas la cual determina las propiedades eléctricas y en gran medida las propiedades ópticas de un material determinado. En los años 70 del siglo pasado parecía que todo estaba bien claro en cuanto a las propiedades de los sólidos en relación con su conductividad eléctrica. Hasta que, en 1980, el investigador alemán Klaus von Klitzing encontró un efecto extraordinario conocido como efecto Hall cuántico (EHC) [1,2].

IV EL EFECTO HALL

Mientras hacía sus estudios de doctorado en 1879, el joven estadounidense de 24 años Edwin Herbert Hall descubrió un efecto relacionado con la electricidad que luego ha tenido una gran trascendencia y múltiples aplicaciones [3]¹. En honor a él se llama efecto Hall y consiste en lo siguiente.

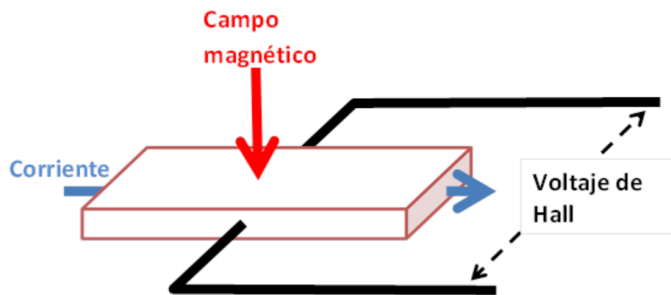


Figura 3. Una medición de Efecto Hall. Se hace pasar una corriente eléctrica a lo largo del material al tiempo que se aplica un campo magnético en una dirección perpendicular. El efecto Hall consiste en que aparece una diferencia de potencial o voltaje entre los extremos de la muestra que se encuentran en una dirección perpendicular tanto al campo magnético como a la corriente.

Si en un material sometido a un campo magnético B relativamente intenso, hacemos pasar una corriente eléctrica I en una dirección perpendicular al campo magnético, aparecerá un voltaje en una dirección perpendicular a ambos, la corriente y el campo magnético, como se ilustra en la Fig. 3. Este voltaje se denomina voltaje de Hall (V_H), y a partir de él se puede definir la conductancia de Hall como el cociente I/V_H . Desde el punto de vista clásico, este efecto se explica a partir de la fuerza de Lorentz que actúa sobre las partículas cargadas.

En su época este fue un descubrimiento notable, pues demostró que la electricidad era conducida en los metales por partículas cargadas negativamente en un momento en que el electrón no se había aún descubierto (esto sucedería casi 20 años después). También permitió descubrir que en ciertos materiales la corriente era transportada por partículas que se comportaban como si estuvieran cargadas positivamente, que hoy se conocen como huecos y que no son más que

el efecto colectivo de una banda permitida casi llena. Hoy el efecto Hall se usa en sensores de campo magnético y en posicionadores de motores de corriente directa, entre otras aplicaciones. Pero sobre todo, el efecto Hall ha dejado una amplia y fructífera secuela que ha permitido un conocimiento cada vez más profundo de las propiedades de la sustancia. En la familia del efecto hoy se incluyen el efecto Hall cuántico, el cuántico fraccionario, el cuántico anómalo, el cuántico de espín y los AT.

Casi cien años después de los experimentos de Hall, el físico alemán Klaus Von Klitzing, realizando mediciones de efecto Hall en capas de solo unos pocos nanómetros de espesor (que dan lugar a lo que se conoce como gas bidimensional de electrones) formadas en la zona de acumulación de un transistor de efecto de campo de silicio usando campos magnéticos muy intensos y temperaturas muy bajas, encontró un resultado asombroso: la conductividad de Hall, σ_H , era siempre un múltiplo de e^2/h donde e es la carga del electrón y h la constante de Planck, o sea $\sigma_H = ne^2/h$, siendo n un entero. Lo realmente asombroso es que la exactitud del número entero n era extraordinariamente alta independientemente de la geometría de la muestra y de las propiedades del material. La conductividad de Hall variaba a saltos y de manera muy precisa a medida que se incrementaba la concentración de electrones (por medio del aumento del voltaje de compuerta, pues el efecto fue demostrado utilizando un transistor de efecto de campo) o el campo magnético aplicado. Al inverso de la conductancia para $n = 1$, h/e^2 , se le llamó Constante de Klitzing y él recibió el premio Nobel de Física en 1985 por este hallazgo. Debido a la extrema precisión para determinar ese número experimentalmente, desde 1990 es usado como patrón de resistencia eléctrica a nivel internacional.

Mientras que los valores de conductancia que se obtienen en el EHC pueden ser explicados a partir de las modificaciones que aparecen en la estructura de bandas por efecto del campo magnético, o sea, la aparición de los denominados niveles de Landau, la extrema estabilidad del valor de la conductancia, solo pudo ser interpretada a partir de efectos topológicos. Fueron Thouless y Haldane quienes, trabajando independientemente, llamaron la atención sobre el carácter topológico del efecto. La resistividad variaba a saltos porque a saltos también variaba la topología del problema. O sea, a medida que se incrementaba el campo magnético la conductividad de Hall se mantenía constante, hasta que el campo provocaba un cambio en la topología y se producía un salto en la resistencia.

En este caso, el equivalente a los agujeros o genus, es un número llamado número de Chern que depende del campo magnético, el cual varía a saltos por lo que pequeñas variaciones de campo magnético no pueden alterarlo; de ahí su estabilidad. Esta fue la explicación definitiva de la causa de la robustez de los valores de la resistencia en el EHC. En este caso, lo que tiene un carácter topológico no son objetos sencillos como los de nuestro ejemplo inicial, sino

¹Es curioso que el interés de Hall en hacer el experimento proviene de un error de James C. Maxwell en su teoría del electromagnetismo. Maxwell suponía que la fuerza sobre un conductor con corriente actuaba sobre el conductor mismo, no sobre los portadores de carga. A Hall le pareció extraño y quiso averiguar si era así o no.

la estructura misma de bandas del material en su interacción con el campo magnético.

Se puede demostrar que la conductancia de Hall se determina por la integral [4]:

$$\sigma_H = \frac{e^2}{2\pi h} \int_{ZB} B(\vec{k}, n) d^2k,$$

en la que B es una función denominada intensidad del campo de Berry (o también curvatura de Berry) que se calcula a partir de las funciones de onda de los electrones, \vec{k} es el momento del cristal y la integral se realiza en toda la zona de Brillouin.

Una generalización del teorema de Gauss- Bonnet debida a Chern [5] utiliza, en vez de la curvatura de una superficie geométrica, la curvatura adiabática, determinada por la curvatura de Berry. Es una ecuación similar a la correspondiente al teorema de Gauss-Bonnet:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{ZB} B(\vec{k}, n) d^2k = C_1,$$

C_1 es un invariante topológico, llamado número de Chern. Este es un número entero, como el número de agujeros en el ejemplo inicial.

A grosso modo, en el EHC ocurre que al variar el campo magnético varía también la curvatura de Berry (así como variaba la curvatura al deformar la esfera), pero dado que la integral tiene que ser un número entero, ella no puede variar continuamente; solo a partir de determinado valor, se producirá un salto en el número de Chern (así como se puede producir un salto en el número de agujeros al perforar la esfera), o sea un cambio en la topología. Al igual que la curvatura de las superficies de un objeto está relacionada con su topología, la curvatura de Berry está relacionada con la topología de la estructura de bandas de un material.

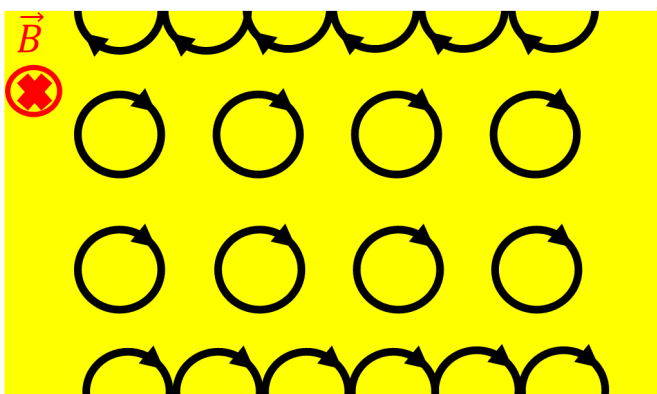


Figura 4. Conducción superficial en el EHC. (La idea de esta figura fue tomada de la ref. [6])

Un aspecto importante en el EHC, sobre todo en relación con los ATs, es que en la dirección de la corriente aparece conductividad superficial como se representa en la Fig. 5. En el interior del material, los electrones se mueven en órbitas circulares debido a la acción del campo magnético (niveles

de Landau) en cierto modo similares a las órbitas de los electrones en los átomos. Sin embargo, los electrones que se mueven cerca de la superficie interrumpen su camino circular al “rebotar” en la superficie, describiendo las trayectorias que se observan en la figura. Se produce una corriente superficial positiva (hacia la derecha) en la cara superior y negativa en la cara inferior.

Los electrones involucrados en estas corrientes, no pueden dispersarse hacia atrás por las impurezas u otros defectos superficiales porque, de cualquier modo, la interacción con el campo magnético los hará moverse siempre hacia adelante, o en otras palabras, porque no existen estados con momento lineal en la dirección contraria: la “vuelta en U” está prohibida para estos electrones. Por eso pueden moverse bastante libremente con una resistencia muy pequeña.

V EFECTO HALL CUÁNTICO DE ESPÍN Y AISLANTES TOPOLÓGICOS

Una de las importantes contribuciones de Haldane fue la propuesta de que el EHC pudiera conseguirse en determinados materiales, aún sin necesidad de aplicar un campo magnético externo, con la condición de que la interacción espín-órbita fuera considerable. Esta interacción entre el momento magnético asociado a la órbita del electrón en el átomo y el espín del electrón se incrementa con el aumento de la carga del núcleo. Por esta razón es de esperarse que ocurra en materiales que contengan elementos pesados.

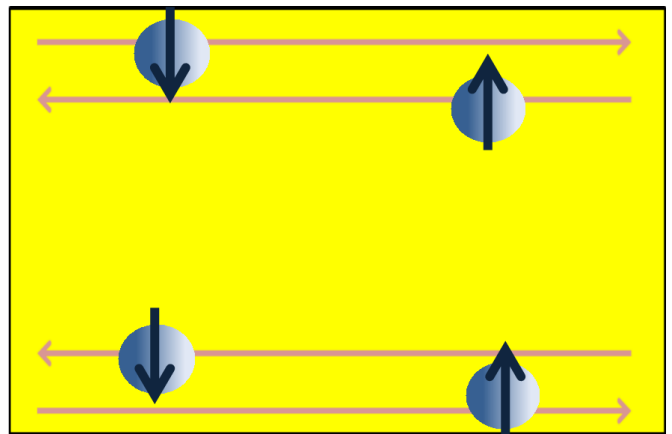


Figura 5. En el efecto Hall cuántico de espín se producen dos canales de conducción en cada arista del semiconductor, la polarización del espín es perpendicular al momento. En la arista inferior, los electrones con momento hacia la derecha tienen el espín hacia arriba y viceversa. En la cara superior ocurre lo contrario.

A esta variante del efecto Hall se le denomina efecto Hall Cuántico de espín (EHCE). Se trata de un efecto bidimensional y fue primero observado en pozos cuánticos del semiconductor HgTe. El papel del campo magnético externo, lo cumple de alguna manera la interacción espín-órbita. En este caso, ocurre un acoplamiento singular entre la polarización del espín y el momento del electrón: en cada una de las aristas exteriores del pozo cuántico se forman dos canales de conducción en los cuales la polarización

del espín y el momento son perpendiculares entre sí, y a momentos contrarios corresponden polarizaciones contrarias del espín como se muestra en la Fig. 5.

Los electrones en estos estados, como en el caso del EHC, también tienen prohibida la dispersión hacia atrás (la “vuelta en U”) pero por una razón diferente. En efecto, pudiera pensarse que en realidad este tipo de dispersión pudiera estar permitida porque en este caso si existen estados con sentido contrario del momento. El requerimiento de simetría ante la inversión del tiempo (SIT) es lo impide este tipo de dispersión en el EHCE.

Un sistema que cumple con la SIT debe mantenerse invariante cuando se cambia el signo del tiempo. Al cambiar el signo del tiempo debe cambiar el signo del momento y también el signo del campo magnético² y del espín. En el caso del EHC, la SIT estaba garantizada ya que si cambiamos el signo del momento y el del campo magnético, las corrientes superficiales que se aprecian en la Fig. 4 se mantendrían en las mismas direcciones. En el caso del EHCE, el asunto es un poco más complicado. Aquí, la dispersión hacia atrás estaría permitida con tal de que el electrón cambiara simultáneamente el sentido de k y el de la polarización del espín, y esto parecería posible porque existe un canal de conducción con momento y espín contrario. Sin embargo, ciertas leyes de la mecánica cuántica prohíben que en la dispersión hacia atrás se cambie el signo del espín. Entonces, la simetría de reversión de tiempo impide este tipo de dispersión también en el EHCE.

Los ATs constituyen una especie de EHCE solo que para materiales 3D. De hecho, también están constituidos por elementos pesados, porque también en ellos la interacción espín-órbita juega un papel fundamental. Ellos son aislantes en el interior, pero en la superficie tienen estados conductores tal como ocurre para las aristas del pozo cuántico en el EHCE, solo que en vez de aristas, en los ATs son superficies. Estos estados conductores en la superficie no son resultado de los típicos defectos superficiales tan bien conocidos en los semiconductores y que también pueden generar estados superficiales en el interior del “gap”. Como veremos a continuación, son un resultado de la topología de la estructura de bandas del material de volumen, del hecho de que en esa región el material de topología no trivial (el AT) está en contacto con el aislante de topología trivial (el vacío o el aire, por ejemplo). Esos estados superficiales no se eliminan por medio de la pasivación, ni tienen que ver con la forma en que se elabore o se trate la superficie. Se dice que están protegidos topológicamente.

Como en el efecto Hall cuántico de espín (EHCE), estos estados tienen la característica de que son quirales, en el sentido de que el momento y la polarización del espín están acoplados. También están protegidos por la SIT que prohíbe la dispersión del tipo “vuelta en U”. Esto hace que la conducción sea robusta y que sea a la vez conducción de carga y de espín. La estructura de bandas consiste en lo que se conoce como conos de Dirac en los que la energía es

proporcional al vector de onda.

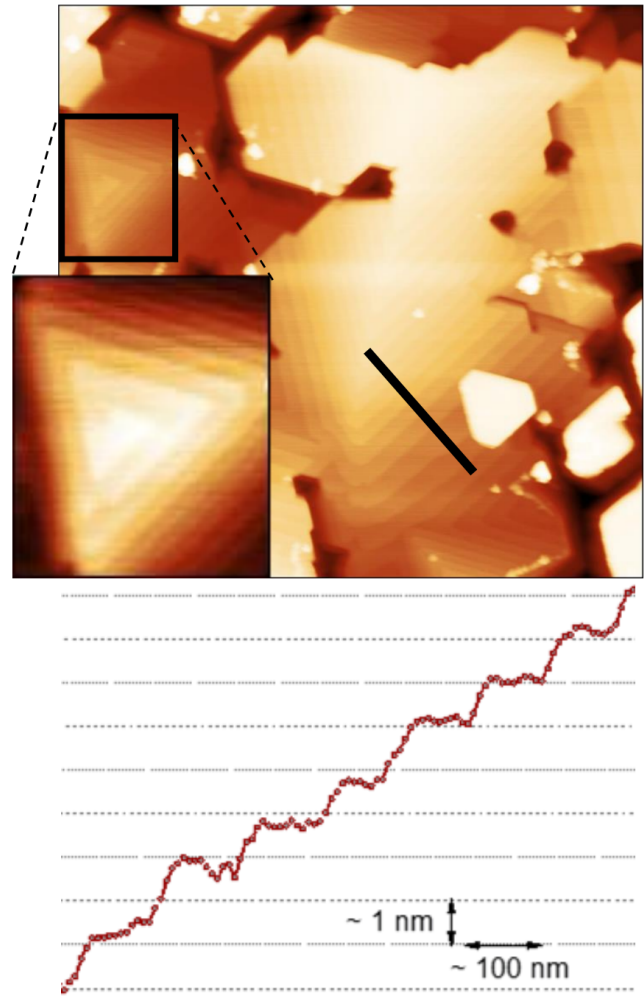


Figura 6. Imagen de la superficie de una capa monocristalina de Bi_2Te_3 obtenida con microscopía de fuerza atómica (parte superior). En el recuadro una vista más ampliada de de una pirámide mostrando la morfología de crecimiento en espiral. Un perfil a lo largo de la línea marcada en la imagen muestra la altura de los pasos (1 nm) y la longitud de las terrazas entre los pasos (100 nm). Obsérvese que la pirámide es muy plana de acuerdo con estos datos.

La existencia ATs fue predicha teóricamente en 2007 [8]; un año después se demostró experimentalmente en monocristales de $\text{Bi}_x\text{Sb}_{1-x}$ [9]. Los autores midieron los conos de Dirac superficiales con una técnica denominada Espectroscopía de Fotoemisión Resuelta en Ángulo (ARPES por sus siglas en inglés) que luego ha sido la técnica de preferencia para probar la condición de AT en un material. Posteriormente se han obtenido varios compuestos de bismuto como el Bi_2Te_3 o Bi_2Se_3 , que también resultaron ser ATs. Estos calcogenuros de bismuto tienen una estructura laminar como el grafeno, aunque en ellos el elemento básico es una capa quintuple que, por ejemplo en el Bi_2Te_3 , tiene un apilamiento Te–Bi–Te–Bi–Te. Lo que los hace aislantes topológicos es el alto valor de la interacción espín-órbita debido al elevado número atómico del bismuto. Se pueden obtener capas monocristalinas de estos materiales mediante

²El cambio del signo del campo magnético puede entenderse suponiendo que el mismo es generado por una bobina. Si cambia el signo del tiempo, los electrones en las espiras comenzarán a moverse en sentido contrario por lo que cambiará el sentido del campo magnético.

técnicas de fase vapor. Como ejemplo, en la Fig. 6 se muestra una imagen de microscopía de fuerza atómica tomada a la superficie de una capa monocristalina de Bi₂Te₃ crecida en los laboratorios de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana por transporte físico de fase vapor. El paso de la espiral es de 1 nm que es el espesor de la capa quintuple para este material.

Recientemente se ha descubierto un sinúmero de diferentes ATs lo que prueba que su existencia es mucho más frecuente de lo que se esperaba. Por eso, en cierta medida, existe hoy una caza de este tipo de materiales. La pregunta entonces es: ¿cómo se buscan los ATs?

La topología de las bandas puede saberse a partir del cálculo del correspondiente invariante topológico. En el caso del efecto Hall este invariante, como se vio arriba, es el número de Chern. En el caso de los aislante topológicos, es un número llamado Z_2 que se calcula también a partir de la curvatura de Berry en determinados puntos de simetría de la zona de Brillouin. Sin entrar en detalles que excederían el objetivo de este trabajo, un material con $Z_2 = 0$ correspondería con un aislante normal (o con topología trivial), si $Z_2 = 1$ entonces el material es un AT.

Un procedimiento para averiguar si la estructura de bandas de un material es o no topológicamente igual a la de otro consiste en lo que se conoce como continuación adiabática. Según este procedimiento se parte de un material con una determinada topología (AT o no) y se varía suavemente el hamiltoniano del sistema hasta que coincida con el del material con el cual se quiere comparar la topología. Para ello se van modificando poco a poco diferentes parámetros como por ejemplo la distancia entre átomos, la composición de los núcleos, o la intensidad del efecto espín-órbita. A medida que se realizan estas variaciones se calcula la estructura de bandas del nuevo material.

En cierto sentido, esto es similar a deformar nuestra esfera del ejemplo inicial. Si distorsionando la esfera podemos llegar a otro objeto sin que se haya abierto ningún agujero, entonces la esfera y el otro objeto tendrán la misma topología. Si en la transformación de la esfera es necesario abrir algún agujero para llegar al segundo objeto entonces la topología de los dos objetos es diferente.

En el caso de la continuación adiabática, el equivalente de abrir un agujero es cerrar el "gap". Esto quiere decir que si transformando el hamiltoniano suavemente podemos llegar de un material a otro sin que en la estructura de bandas se haya cerrado el "gap" en ninguno de los pasos, esto quiere decir que ambos materiales son topológicamente equivalentes. Si el primero es un aislante topológico, el segundo también lo será. De esta manera se pueden predecir nuevos AT a partir de otros conocidos. Hay también algunas indicaciones generales para encontrar un AT. Por ejemplo, la interacción espín-órbita debe ser grande y debe haber una inversión de bandas en alguna región de la zona de Brillouin, lo que se traduce en que las bandas no estén en el orden

natural (por ejemplo, que la banda tipo p esté por encima de la banda tipo s , al contrario de su orden natural en la mayoría de los semiconductores).

VI CONCLUSIONES

Se dice que los aislantes topológicos representan la emergencia del espín del electron, que pasa a ser de un espectador a un guía, que hacen que se centre la atención en la ecuación de Dirac mas que en la de Schrödinger. También se especula sobre nuevas implicaciones topológicas más allá de las actualmente descubiertas y de la necesidad de encontrar algún principio organizativo para los materiales en relación con su topología, así como la tabla periódica organiza los elementos, y la simetría, las partículas elementales [12].

Por otra parte, lejos de lo que se pensaba inicialmente, hay ¡muchos! materiales que han resultado ser ATs. No cuesta mucho trabajo fabricarlos y sus propiedades se pueden estudiar a temperatura ambiente. ¿Qué más se puede pedir? Esto ha creado una gran expectativa pues las aplicaciones de estos materiales pudieran ser muchas y muy importantes: se habla de una nueva computación topológica y de una nueva electrónica basada no en la carga sino en el espín del electrón, la espintrónica. También del posible descubrimiento de partículas exóticas, previstas teóricamente pero hasta ahora no encontradas, como por ejemplo los fermiones de Majorana. Estos fermiones, que tendrían la singular propiedad de ser sus propias antipartículas, pudieran aparecer en la superficie de contacto de un superconductor y un aislante topológico. Hoy, todo eso parece exótico, pero seguramente tanto como en los años cincuenta lo fue el transistor que ha revolucionado nuestras vidas en menos de una centuria, de una manera fabulosa.

REFERENCIAS

- [1] K. v. Klitzing, *Seminaire Poincaré* 2, 1 (2004).
- [2] K. v. Klitzing, G. Dorda and M. Pepper, *Phys. Rev. Lett.* 45, 494 (1980).
- [3] E. Hall, *American Journal of Mathematics*. 2, 287 (1879).
- [4] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, M. Den Nijs, *Phys. Rev. Lett.*, 49, 405 (1982).
- [5] S. Chern, *Annals of Mathematics* 45, 747 (1944).
- [6] C. Kane, J. Moore, *Physics World* 24, 32 (2011).
- [7] F.D.M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.*, 61, 1988 (2015).
- [8] F. Liang, C. L. Kane, *Phys. Rev. B* 76 045302 (2007).
- [9] D. Hsieh, D. Qian, L. Wray, Y. Xia, Y. S. Hor, R. J. Cava, M. Z. Hasan, *Nature* 452 970 (2008).
- [10] O. Concepción, O. de Melo, A. Escobosa, *Appl. Surf. Sci.* (enviado a publicar).
- [11] A. Bansil, H. Lin, T. Das, *Rev. Mod. Phys.* 88 021004 (2016).
- [12] S. Zhang, *Physics* 1, 6 (2008).

BEREZINSKII-KOSTERLITZ-THOULESS TRANSITION AND THE HALDANE CONJECTURE: HIGHLIGHTS OF THE PHYSICS NOBEL PRIZE 2016

LA TRANSICIÓN DE BERZINSKII-KOSTERLITZ-THOULESS Y LA CONJETURA DE HALDANE: HECHOS DESTACADOS DEL PREMIO NOBEL DE FSICA 2016

W. BIETENHOLZ^{a,b} AND U. GERBER^{a,c}

a) Instituto de Ciencias Nucleares Universidad Nacional Autónoma de México A.P. 70-543, C.P. 04510 Ciudad de México, Mexico; wolbi@nucleares.unam.mx[†]

b) Albert Einstein Center for Fundamental Physics Institute for Theoretical Physics Bern University, Sidlerstrasse 5, CH-3012 Bern, Switzerland

c) Instituto de Física y Matemáticas Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Edificio C-3 Apdo. Postal 2-82, C.P. 58040, Morelia, Michoacán, México

[†] autor para la correspondencia

Received 1/11/2016; Accepted 1/12/2016

The 2016 Physics Nobel Prize honors a variety of discoveries related to topological phases and phase transitions. Here we sketch two exciting facets: the groundbreaking works by John Kosterlitz and David Thouless on phase transitions of infinite order, and by Duncan Haldane on the energy gaps in quantum spin chains. These insights came as surprises in the 1970s and 1980s, respectively, and they have both initiated new fields of research in theoretical and experimental physics.

El premio Nobel de Física 2016 honra una variedad de descubrimientos relacionados con fases topológicas y transiciones de fases. Aquí tratamos dos de estas interesantes facetas: los trabajos seminales de John Kosterlitz y David Thouless en transiciones de fases de orden infinito, y por Duncan Haldane sobre los “gaps” de energía en cadenas cuánticas de espín. Estos hallazgos constituyeron una sorpresa en los 1970s y 1980s, respectivamente, e iniciaron nuevos campos de investigación en la fsica teórica y experimental.

PACS: General theory of phase transitions, 64.60.Bd; Statistical mechanics of model systems, 64.60.De; General theory of critical region behavior, 64.60.fd; Equilibrium properties near critical points, critical exponents, 64.60.F-

I CLASSICAL SPIN MODELS

When we hear the word “spin” we usually think of Quantum Mechanics, where particles are endowed with an internal degree of freedom, which manifests itself like an angular momentum. So what does a “classical spin” mean?

It is much simpler: it is just a vector (or multi-scalar) \vec{e} , say with N components; here we assume them to be real,

$$\vec{e} = \begin{pmatrix} e^{(1)} \\ \cdot \\ \cdot \\ e^{(N)} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^N. \tag{1}$$

Models which deal with such *classical spin fields* are usually formulated on a lattice (or grid), such that a spin \vec{e}_x is attached to each lattice site x . In solid state physics, \vec{e}_x might represent a collective spin of some crystal cell. If it is composed of many quantum spins, it appears classical [1].

If the spin directions are fixed on all sites x , we obtain a *configuration*, which we denote as $[\vec{e}]$.

In a number of very popular models, the length of each spin variable is normalized to $|\vec{e}_x| = 1, \forall x$. Then the spin field maps the sites onto a unit sphere in the N -dimensional spin

space, $x \rightarrow S^{N-1}$. We are going to refer to this setting, and (for simplicity) to a lattice of unit spacing, with sites $x \in \mathbb{Z}^d$ in d dimensions.

To define a model, we still need to specify a *Hamilton function* $\mathcal{H}[\vec{e}]$ (no operator), which fixes the energy of any possible spin configuration. Its standard form reads

$$\mathcal{H}[\vec{e}] = J \sum_{\langle xy \rangle} (1 - \vec{e}_x \cdot \vec{e}_y) - \vec{H} \cdot \sum_x \vec{e}_x, \tag{2}$$

where the symbol $\langle xy \rangle$ denotes nearest neighbor sites. J is a coupling constant, and we see that $J > 0$ describes a *ferromagnetic* behavior: (approximately) parallel spins are favored, since they minimize the energy.¹ \vec{H} is an external “magnetic field” (in a generalized sense), which may or may not be included;² its presence favors spin orientations in the direction of \vec{H} .

Thus we arrive at a set of highly prominent models in statistical mechanics, depending on the spin dimension N :

N	Vector Space	Model
1	$e_x \in \{-1, +1\}$	Ising
2	$\vec{e}_x^T = (\cos \varphi_x, \sin \varphi_x)$	XY
3	$\vec{e}_x^T = (\sin \theta_x \cos \varphi_x, \sin \theta_x \sin \varphi_x, \cos \theta_x)$	Heisenberg

¹Vice versa, $J < 0$ describes anti-ferromagnets, which also occur in models (cf. Section 3) and in Nature, e.g. Cr, Mn, Fe₂O₃ and NiS₂.

²In field theory one usually deals with “source fields”, which correspond to a space dependent external field of this kind, i.e. to a term $\sum_x \vec{H}_x \cdot \vec{e}_x$.

where $\varphi_x, \theta_x \in \mathbb{R}$. These models are discussed in numerous text books, such as Refs. [1–3].

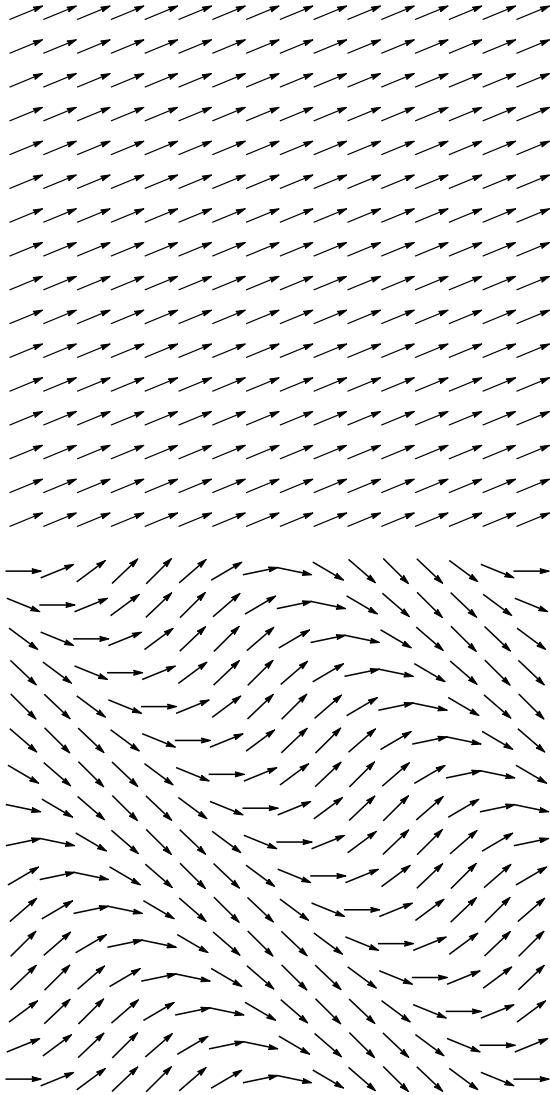


Figura 1. Examples for a uniform configuration of minimal energy (top) and for a non-uniform configuration of higher energy (bottom), in the 2d XY model.

Although it might seem ridiculously simple, the *Ising model* is incredibly successful in describing a whole host of physical phenomena. The *XY model* will be addressed in Section 2; its best application is to model superfluid Helium. The *Heisenberg model* captures actual ferromagnets, like iron, cobalt and nickel. Section 3.1 refers to its 2D version, which is also a toy model for Quantum Chromodynamics (QCD), since it shares fundamental properties like asymptotic freedom, topological sectors, and a dynamically generated mass gap. The *large N limit* also attracts attention, since it

³The $O(4)$ model is of interest as well, in particular due to the local isomorphy $O(4) \sim SU(2) \otimes SU(2)$. The latter is the flavor chiral symmetry of QCD with two massless flavors. Here the magnetic field corresponds to the small masses of the quark flavors u and d , which break the symmetry down to $O(3) \sim SU(2)$.

⁴We express the temperature in units of the Boltzmann constant k_B , which amounts to setting $k_B = 1$ throughout this article.

⁵In $N \geq 2$ the number of configurations is infinite. For the Ising model in a lattice volume V , *i.e.* with V lattice sites, their number is 2^V . Even for a modest volume, say a 32×32 lattice, this is a huge number of $O(10^{308})$, so straight summation is not feasible, not even with supercomputers. Hence to compute expectation values (see below) one resorts to *importance sampling* by means of Monte Carlo simulations. For a text book and a recent introductory review, see Refs. [4].

leads to simplifications, which enable analytical calculations, see *e.g.* Ref. [3].

They are also called non-linear σ -models, or $O(N)$ models, since — with the Hamilton function (2) at $\vec{H} = \vec{0}$ — they have a global $O(N)$ symmetry (or $Z(2)$ symmetry in case of the Ising model): the energy remains invariant if we perform the same rotation on all spins, $\vec{e}_x \rightarrow \Omega \vec{e}_x$, $\Omega \in O(N)$.³

If the system has temperature T , the probability for a configuration $[\vec{e}]$ is given by⁴

$$p[\vec{e}] = \frac{1}{Z} e^{-\mathcal{H}[\vec{e}]/T}, \quad \text{with} \quad Z = \sum_{[\vec{e}]} e^{-\mathcal{H}[\vec{e}]/T} = e^{-F/T}. \quad (3)$$

The *partition function* Z is obtained by summing (or integrating) over *all* possible configurations,⁵ and $F = -\frac{1}{T} \ln Z$ is the *free energy*.

For $J > 0$ the uniform configurations are most probable, since they have the minimal energy $-VH$ (where $H = |\vec{H}|$). An example is shown in Fig. 1 (left), and in the limit $T \rightarrow 0$ the system will take such a uniform configuration. For increasing T , fluctuating configurations — like the one in Fig. 1 (right) — gain more importance. They carry higher energy, so the exponential $\exp(-\mathcal{H}[\vec{e}]/T)$ suppresses them. On the other hand, there are *many* of them, and the combinatorial factor is relevant too. This is the *entropy effect*, which also matters for their impact, and which plays a key role in Section 2.

1.1 *n*-point functions and phase transitions

What does it mean to have an “impact”? What physical quantities are affected? In exact analogy to field theory, the physical terms are expectation values of some products of spins; if they involve n factors, they are called *n*-point functions.

The most important observable is the 2-point function, or *correlation function*,

$$\langle \vec{e}_x \cdot \vec{e}_y \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{[\vec{e}]} \vec{e}_x \cdot \vec{e}_y e^{-\mathcal{H}[\vec{e}]/T}. \quad (4)$$

One often focuses on its “connected part”, which — in most cases — decays exponentially in the distance $|x - y|$,

$$\langle \vec{e}_x \cdot \vec{e}_y \rangle_{\text{con}} = \langle \vec{e}_x \cdot \vec{e}_y \rangle - \langle \vec{e}_x \rangle \cdot \langle \vec{e}_y \rangle = \langle \vec{e}_x \cdot \vec{e}_y \rangle - \langle \vec{e} \rangle^2 \propto e^{-|x-y|/\xi}. \quad (5)$$

With the Hamilton function (2) the system is lattice translation invariant, so the 1-point function $\langle \vec{e}_x \rangle$ does not depend on the site x , and we can just write $\langle \vec{e} \rangle$,

$$\langle \vec{e}_x \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{[\vec{e}]} \vec{e}_x e^{-\mathcal{H}[\vec{e}]/T} = \langle \vec{e} \rangle. \quad (6)$$

The decay rate of $\langle \vec{e}_x \cdot \vec{e}_y \rangle_{\text{con}}$ is given by the *correlation length* ξ , which serves as *the* scale of the system: any dimensional quantity is considered “large” or “small” based on its comparison with (the suitable power of) ξ . Regarding the energy spectrum, ξ represents the inverse *energy gap*, $1/\xi = E_1 - E_0$. In quantum field theory, this is just the *mass* of the particle, which emerges by the minimal (quantized) excitations of the field under consideration.

The phase transitions that we are interested in are of order 2 or higher, and they are characterized by the property that ξ *diverges*. In a phase diagram, with axes like T and H , this happens in a *critical point*,⁶ in particular at a *critical temperature* T_c . The way how ξ diverges in the vicinity of a critical point defines the *critical exponent* ν ,

$$\lim_{T \rightarrow T_c} \xi \propto (T - T_c)^{-\nu}, \quad (7)$$

where we assume the same power regardless whether T_c is approached from above or from below (which usually holds). There are a number of critical exponents, which characterize the system close to a critical point; we will see further examples below.

In the limit $\xi \rightarrow \infty$, the spacing between the lattice points becomes insignificant (it is negligible compared to ξ), so this is the *continuum limit*. This is why the vicinity of a critical point is so much of interest.

Intuitively it is clear that high temperature gives importance to “wild fluctuations”, which suppress long-distance correlations, inducing a short ξ . So, does ξ diverge only in the limit $T \rightarrow 0$? This is indeed the case for the 1D Ising model [5]. It does not have an actual transition (with phases on both sides), and the model is considered uninteresting. However, the Ising model does have a finite critical temperature in dimension $d = 2$ [6] or higher, and the same applies to $N > 1$.

The simplest observable is the 1-point function, or *condensate*, of eq. (6), which also defines the *magnetization* M (in some lattice volume V),

$$\vec{m}[\vec{e}] = \sum_x \vec{e}_x, \quad M = |\langle \vec{m} \rangle| = V |\langle \vec{e} \rangle|. \quad (8)$$

$M > 0$ indicates that the $O(N)$ symmetry is broken. An external field $H > 0$ causes an explicit breaking. If we start with an external field and gradually turn it off, the destiny of the system depends on the temperature:

- At low T , the system keeps a dominant orientation in the direction of \vec{H} , at $T \rightarrow 0$ it will pick the corresponding uniform configuration. This is known as “spontaneous symmetry breaking”, it reduces the symmetry group to $O(N - 1)$.
- At high T , the system allows for wild fluctuations, and after turning off \vec{H} it hardly “remembers” its direction.

In this case, the $O(N)$ symmetry is restored, since the dominant contributions to an expectation value are due to configurations without such a preferred orientation.

Thus the magnetization M discriminates the scenarios where the $O(N)$ symmetry is broken ($M > 0$) or intact ($M \simeq 0$). Therefore it is an *order parameter*: it is finite (it vanishes) below (above) the critical temperature T_c (which is also called “Curie temperature”). The way how it converges to 0, as T approaches T_c from below, defines another critical exponent β ,

$$\lim_{T \nearrow T_c} M \propto (T_c - T)^\beta. \quad (9)$$

The follow-up example is the critical exponent γ , which characterizes the divergence of the magnetic susceptibility χ_m , at a temperature T close to T_c ,

$$\chi_m = \frac{1}{V} (\langle \vec{m}^2 \rangle - \langle \vec{m} \rangle^2) \propto |T - T_c|^{-\gamma}. \quad (10)$$

As in the case of ν , also the exponent γ is usually the same for $T \gtrsim T_c$ and for $T \lesssim T_c$.

There are classes of systems, which may look quite different, but which share the same critical behavior, so we say that they belong to the same *universality class*. This means in particular that the critical exponents coincide within a universality class. The enormous success of the Ising model is due to the fact that there are many models — and real systems — in the same universality class, so the Ising model captures their behavior next to a continuum limit.

II BEREZINSKII-KOSTERLITZ-THOULESS TRANSITION IN THE 2D XY MODEL

This section deals with the 2D XY model, which is among the classical spin models introduced in Section 1. We can imagine a 2D square lattice, where each site $x = (x_1, x_2)$, $x_\mu \in \mathbb{Z}$, carries a “watch hand” \vec{e}_x , like an arrow from the origin to some point on a unit circle. These vectors are parameterizable by an angle φ_x , $\vec{e}_x = (\cos \varphi_x, \sin \varphi_x)$, as we mentioned before.

We formulate the angular difference between two spins as

$$\Delta\varphi_{x,y} = (\varphi_y - \varphi_x) \bmod 2\pi \in (-\pi, \pi], \quad (11)$$

i.e. the modulo operation acts such that it picks the minimal absolute value.

Now let us consider one *plaquette*, *i.e.* one elementary square of the lattice with corners $x, x + \hat{1}, x + \hat{2}, x + \hat{1} + \hat{2}$, where $\hat{\mu}$ is a unit vector in μ -direction. For a given configuration, each plaquette has a *vortex number* v_x ,

$$v_x = \frac{1}{2\pi} (\Delta\varphi_{x,x+\hat{1}} + \Delta\varphi_{x+\hat{1},x+\hat{1}+\hat{2}} + \Delta\varphi_{x+\hat{1}+\hat{2},x+\hat{2}} + \Delta\varphi_{x+\hat{2},x}) \in \{-1, 0, +1\}. \quad (12)$$

If the configuration is smooth (close to uniform) in the range of this plaquette, we expect $v_x = 0$. In case of sizable angular differences $|\Delta\varphi_{x,x+\hat{\mu}}|$, however, we might encounter

⁶Phase transitions of first order are more frequent, and they do not correspond to a critical point, but we won't discuss them.

a *topological defect*: this could be a *vortex*, which we denote as V, or an *anti-vortex*, AV. We assign them vortex number +1 and -1, respectively,

vortex	V	$v_x = +1$
anti-vortex	AV	$v_x = -1$.

Examples for a configuration with one V or one AV are shown in Fig. 2. On the other hand, the configurations in Fig. 1 do not contain any topological defects.

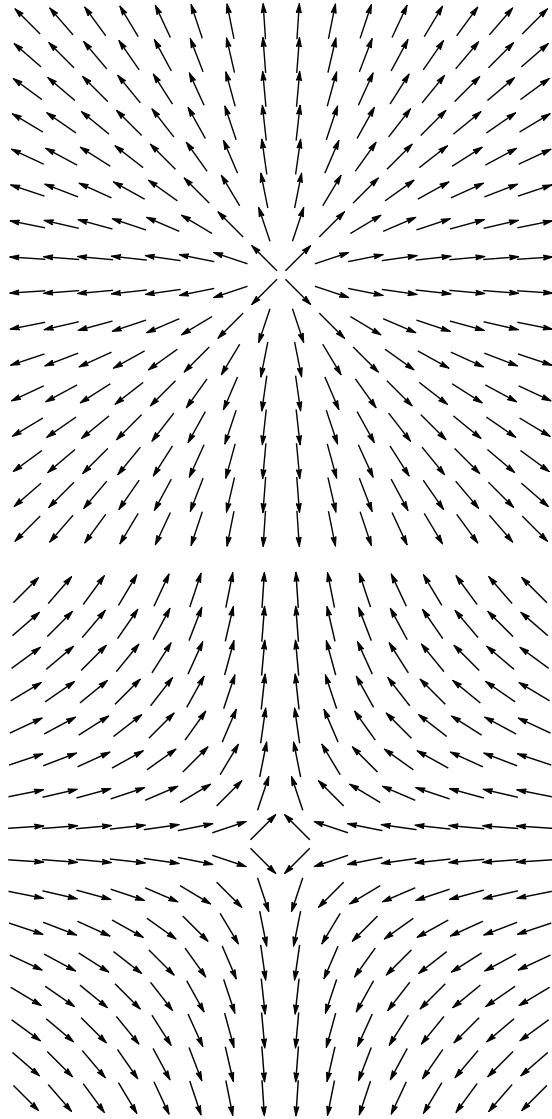


Figura 2. Examples for configurations with one vortex V (left), and with one anti-vortex VA (right), in the 2d XY model.

In numerical studies, we have to deal with a finite lattice volume V , and we usually implement periodic boundary conditions in both directions; this provides lattice translation invariance. Then, the volume represents a torus, and the total vorticity vanishes, $\sum_x v_x = 0$, due to Stokes' Theorem. So, the number of vortices must be equal to the number of anti-vortices, $n_V = n_{AV}$, and the configurations of Fig. 2 are actually incompatible with periodic boundaries.

In fact, the global system does not have topological sectors, since its homotopy group is trivial, $\Pi_2(S^2) = \{0\}$. Nevertheless, the *local* topological defects V and AV are the crucial degrees of freedom for its phase transition.

II.1 First look

A first look suggests the following picture:

- The presence of many V and AV, *i.e.* a *high vorticity density*

$$\rho = \langle n_V + n_{AV} \rangle / V = 2 \langle n_V \rangle / V,$$

means that strong fluctuations are powerful, and they destroy the long-range correlations. Hence the corresponding smooth configurations are suppressed, the correlation function $\langle \vec{e}_x \cdot \vec{e}_y \rangle$ decays rapidly, as in relation (5), and we obtain a correlation length ξ of a few lattice spacings. Due to the interpretation of $1/\xi$ as a mass, this is called the *massive phase*.

- On the other hand, for a *low vorticity density*, $\rho \ll 1$, long-range correlation dominates. It is not disturbed significantly by the few V and AV that are floating around, and we are in the *massless phase*, where $\xi = \infty$. Here the correlation function $\langle \vec{e}_x \cdot \vec{e}_y \rangle$ does not decay exponentially, but only with some negative power of $|x - y|$.

If we start from low temperature and increase T gradually, this gives more importance to “rough” rather than smooth configurations — they are far from uniform, with strong fluctuations. This increases the vorticity density ρ , and at the critical temperature ρ is large enough to mess up the long-range correlations, so the system enters its massive phase.

To make this point more explicit, we estimate the energy that it takes to implement one V or one AV in an otherwise smooth configuration. We do so in a simplified scheme of a quasi-continuous plane: close to the transition this can be justified since ξ (the relevant scale) is much larger than the lattice spacing. Then the angular field $\varphi(x)$ of the simplest (rotationally symmetric) V or AV, with its core at $x = 0$, obeys

$$|\vec{\nabla}\varphi(x)| = \frac{1}{r}, \quad r = |x|, \quad (13)$$

with opposite gradient directions for a V or an AV, see Fig. 2. In this continuum picture, the vorticity v is given by a curl integral, anti-clockwise around the core,

$$v = \frac{1}{2\pi} \oint d\vec{x} \cdot \vec{\nabla}\varphi(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} r d\varphi \left(\pm \frac{1}{r} \right) \quad (14)$$

$$= \pm 1 \text{ for } \left\{ \begin{array}{l} \text{a vortex} \\ \text{an anti-vortex.} \end{array} \right\} \quad (15)$$

Regarding the energy, we note that the Hamilton function (2) (at $\vec{H} = \vec{0}$) can be considered as a kinetic term, made of discrete derivatives,

$$J \sum_{\mu=1}^2 (1 - \vec{e}_x \cdot \vec{e}_{x+\hat{\mu}}) \approx \frac{J}{2} \sum_{\mu=1}^2 \Delta \varphi_{x,x+\hat{\mu}}^2 \approx \frac{J}{2} \vec{\nabla} \varphi(x) \cdot \vec{\nabla} \varphi(x). \quad (16)$$

Here we switched from lattice to continuum notation, and we neglect $O(\Delta \varphi_{x,x+\hat{\mu}}^4)$.

If we insert relations (13) and (16) into the Hamilton function, we obtain an estimate for the energy requirement for inserting one V or AV into a smooth “background”,

$$E_V = \frac{J}{2} \int d^2x \vec{\nabla} \varphi(x) \cdot \vec{\nabla} \varphi(x) \approx J\pi \int_1^L dr \frac{1}{r} = J\pi \ln L. \quad (17)$$

Note that (despite the continuum notation) L expresses the system size in lattice units, so it is dimensionless (and taking its logarithm makes sense). The integral over the plane is a bit sloppy regarding the shape of the volume; it is approximated by a circle of radius L , except for a small inner disc with the radius of one lattice spacing (which we have set to 1). The latter matches the illustrations in Fig. 2, and such an UV cutoff is needed to obtain a finite result.

Even this simplified consideration captures relevant properties. The energy for a single V or VA is considerable: it is enhanced $\propto \ln L$, so it takes a high temperature to make such vortex excitations frequent. In the thermodynamic limit, $L \rightarrow \infty$, they seem to be excluded, but we will see in Section 2.2 why the topological defects are so important nevertheless. Vadim L. Berezinskii (1935-80) explored these properties in 1971/2 [7]. He was working in Moscow, where he pioneered the vortex picture [8].

II.2 Refined picture

The picture of Section 2.1 can be criticized for assuming either a single V or a single AV in the entire configuration, although we stressed before that their number must be equal (with periodic boundaries). So the minimal excitation of topological defects leads to one V plus one AV, as illustrated in Fig. 3, and the above calculation has to be revised. In fact, the result is not $E_{V,AV}^{\text{isolated}} = 2E_V = 2\pi J \ln L$, but instead

$$E_{V,AV} = 2\pi J \ln r_{V,AV}, \quad (18)$$

where $r_{V,AV}$ is the distance between the V and AV core. This can be understood qualitatively: if the V–AV pair is tightly bound, its long-range impact cancels; at large distance, the configuration can be practically uniform, as in the absence of any vortices. If we observe the system with a low resolution (corresponding to a large ξ), we do not see this pair at all.

Only pulling them far apart leads to “free” V and AV, which are visible to such an observer. When $r_{V,AV}$ reaches the magnitude of L , the energy requirement is of the order of $E_{V,AV}^{\text{isolated}}$.

From eq. (18) we see that the trend towards minimal energy implies an *attractive force* $\propto 1/r_{V,AV}$ between the V and AV cores. In $d = 2$ this is a Coulomb force, so a few V and AV spread over the plane can be considered as a *Coulomb gas*. Its free energy F consists of the total energy E , plus an entropy term.

In the period 1972-4, John M. Kosterlitz (born 1942 in Aberdeen), and David J. Thouless (born 1934 in Bearsden), both from Scotland, worked on this issue at the University of Birmingham. They concluded that the driving force of the transition between the massive and the massless phase is not exactly the density ρ (referred to in Section 2.1), but the density of “free vortices and anti-vortices”, *i.e.* V or AV without any opposite partner nearby. So the phase transition is actually *driven by the (un)binding of V–AV pairs* [9].

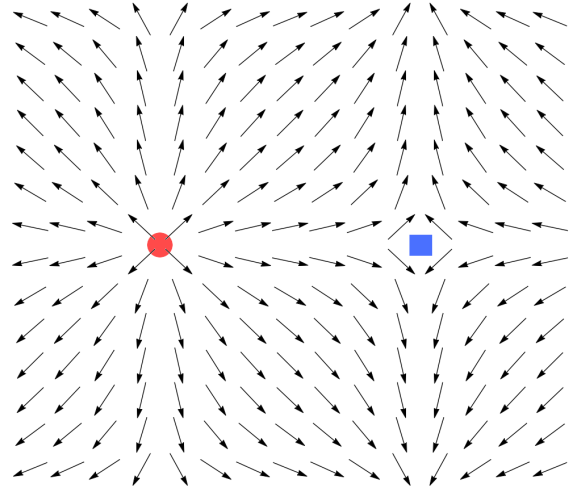


Figure 3. Profile of a configuration with a V–AV pair, with zero total vorticity: the V (AV) core is indicated by a red dot (blue square). Its energy is estimated in eq. (18).

To make this picture more explicit, we consider the free energy F , say in a sub-volume which is large enough to accommodate one free V. It is convenient to call its size L , and to recycle formula (17). The entropy S is the logarithm of the multiplicity of such configurations, here this is just the number of L^2 plaquettes where the vortex could be located. This yields

$$F = E_V - TS = J\pi \ln L - T \ln L^2 = (J\pi - 2T) \ln L, \quad (19)$$

and the phase of the system depends on the question which of these two terms dominates.

- At low T there are hardly any free V or AV (they are suppressed when L becomes large), though there might be some tight V–AV pairs.
- At high T these pairs unbind: due to the dominance of the second term, a large size L makes it easy to spread free V and AV all over the system.

In this setting, eq. (19) suggests that the critical temperature, where the transition happens, amounts to $T_c = J\pi/2$ [9].

II.3 Critical behavior

Kosterlitz and Thouless predicted a type of phase transition, which was unknown before the 1970s. The correlation length diverges at T_c , as in the well-known phase transitions of second order (at least for $T \searrow T_c$), but in contrast to them *no symmetry breaking is involved*. This means a step beyond Landau's Theory, which successfully describes second order phase transitions with the concept of spontaneous symmetry breaking. In low dimensions ($D \leq 2$), however, thermal fluctuations are powerful enough to prevent spontaneous ordering, like a magnetization $M > 0$. This has been explained generally by the Mermin-Wagner Theorem, and specifically for the 2D $O(N)$ models in Ref. [10]. The characteristics of the BKT transition were also confirmed experimentally, in particular in thin films of superfluid ^4He [11] and of superconductors [12].

With respect to the critical exponents, this transition was discussed comprehensively by Kosterlitz in 1974 [13], by employing Renormalization Group techniques. He pointed out that this is a phase transition of infinite order, an *essential phase transition*. The correlation length ξ is not described by a power divergence as in relation (7), but by an essential singularity,

$$\xi \propto \exp\left(\frac{\text{const.}}{(T - T_c)^{\nu_e}}\right), \quad T \gtrsim T_c. \quad (20)$$

Thus one defines a critical exponent ν_e for the exponential growth of ξ ; Kosterlitz derived its value $\nu_e = 1/2$.

Since there is no symmetry breaking going on in the BKT transitions, we cannot address the critical exponent β , and the susceptibility χ_m does not follow relation (10) either. The critical exponents of Section 1.1 all refer to infinite volume, but in the 2D XY model at $V = L \times L \rightarrow \infty$, χ_m diverges throughout the massless phase. Kosterlitz predicted how it diverges as a function of L (the scale which is left) [13],

$$\chi_m \propto L^{2-\eta_e} (\ln L)^{-2r_e}, \quad \eta_e = 1/4, \quad r_e = -1/16. \quad (21)$$

This prediction is hard to verify numerically: studying the logarithmic term (and further sub-leading logarithms) requires huge volumes. The best confirmation with the standard Hamilton function (2) was given in Ref. [14]. It is based on simulations up to size $L = 2048$, and the outcome is consistent with the predicted exponents η_e and r_e , though r_e comes with a large error bar.

At this point we mention an alternative and entirely different Hamilton function for the $O(N)$ spin models. Unlike the term (2), it does not include any (discrete) derivative term, but just a cutoff δ for the angular difference between any two nearest neighbor spins,

$$\mathcal{H}[\vec{e}] = \begin{cases} 0 & \text{if } |\Delta\varphi_{x,x+\hat{\mu}}| < \delta \quad \forall x, \mu \\ \infty & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (22)$$

Such a *constraint Hamilton function* is *topologically invariant*, which means that most small modifications of a configuration leave the energy exactly invariant. This is highly unusual:

part of the configurations are excluded (those that violate the constraint), while all others have energy 0. Still, it has the same symmetries as the standard action, and it belongs to the same universality class [15–17].

There is no temperature in this formulation, but the constraint angle δ plays a role, which bears some analogy. In fact, there is a critical δ_c , and the system is in its massive (massless) phase for $\delta > \delta_c$ ($\delta < \delta_c$). The correlation length exhibits an exponential divergence as in relation (20) when δ approaches its critical value within the massive phase [16],

$$\xi \propto \exp\left(\frac{\text{const.}}{(\delta - \delta_c)^{\nu_e}}\right), \quad \delta \gtrsim \delta_c. \quad (23)$$

This observation singles out the critical constraint angle $\delta_c = 1.775(1)$. Fig. 4 shows this divergence as $\delta > \delta_c$ decreases, and the fit yields $\nu_e = 0.503(7)$, accurately confirming Kosterlitz' prediction.

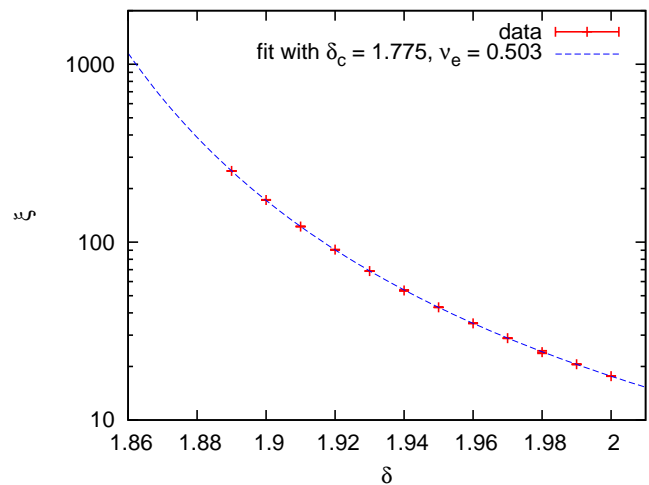


Figure 4. The exponential divergence of the correlation length ξ , as δ decreases towards $\delta_c \approx 1.775$. A fit to relation (23) confirms Kosterlitz' prediction for ν_e .

Regarding the limit within the massless phase, the divergence of the susceptibility χ_m is consistent with the relation (21), and η_e is confirmed to two digits, whereas the value for r_e is plagued by large uncertainties [16], as in Ref. [14].

Another prediction for the BKT transition in the 2D XY model refers to the *helicity modulus*. In its dimensionless form, it is defined as

$$\Upsilon = \frac{1}{T} \frac{\partial^2 F}{\partial \alpha^2} \Big|_{\alpha=0}, \quad (24)$$

where α is a twist angle in the boundary conditions. The free energy F is minimal at $\alpha = 0$ (periodic boundaries), and Υ is the curvature in this minimum.

The qualitative picture is illustrated in Fig. 5 (left): in the large volume limit, one expects Υ to perform a jump at T_c . Soon after the BKT transition had been put forward, the height of this jump was predicted as $2/\pi$ [18]. Later a small correction was subtracted to obtain the theoretical value [19]

$$\Upsilon_{c,\text{theory}} = \frac{2}{\pi} \left(1 - 16e^{-4\pi}\right) \approx 0.6365. \quad (25)$$

Regarding the constraint Hamilton function, we can interpret $\frac{1}{2} \exp(-F(\alpha)/T)$ generally as the probability for a (dynamical) twist angle α , so the helicity modulus can be studied without the concept of temperature.

Fig. 5 (right) summarizes simulation results for Υ_c obtained with various lattice Hamilton functions. The standard formulation (2) is very tedious in this regard: even simulations at $L = 2048$ yielded $\Upsilon_c = 0.67826(7)$ [14], which is far too high. Somewhat more successful was the use of a “step Hamilton function”, which is also topologically invariant: when $|\Delta\varphi_{x,x+\hat{\mu}}|$ exceeds $\delta = \pi/2$, the energy contributions of this pair of neighboring spins jumps from zero to some finite value, which is varied (instead of varying δ). Here $L = 256$ led to $\Upsilon_c = 0.6634(6)$ [20], but it still took faith to accept the compatibility of the large- L extrapolation with the theoretical value in eq. (25).

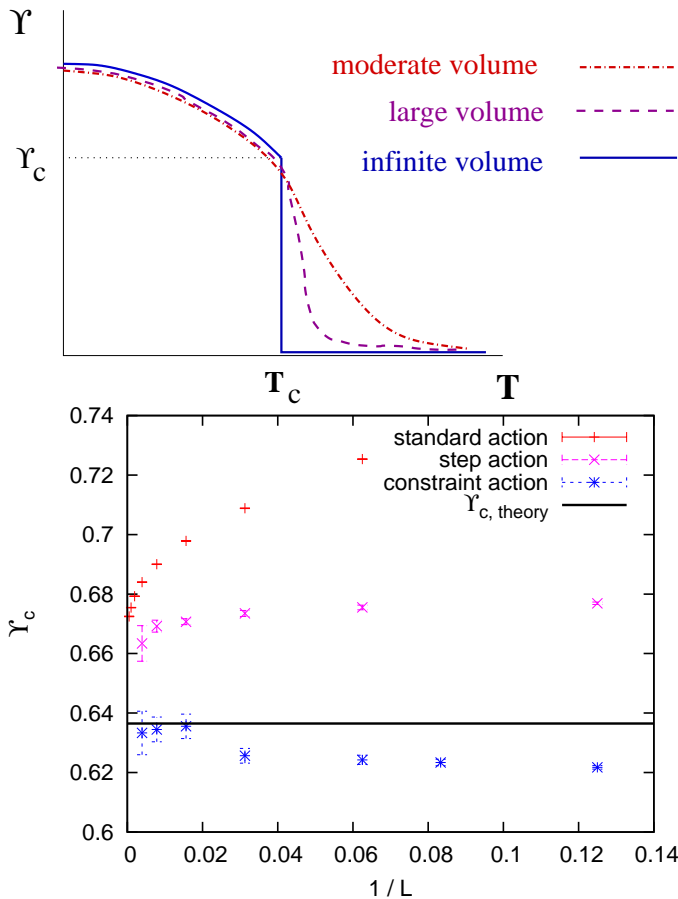


Figure 5. A qualitative picture of the helicity modulus Υ depending on the temperature (top), and an overview over numerical results for its helicity jump at the critical point, Υ_c (bottom).

This compatibility was finally demonstrated beyond doubt with the constraint Hamilton function (22). As a function of δ (replacing T), Υ behaves exactly as depicted in Fig. 5 (left): a jump is observed around δ_c , and it becomes more marked as the volume increases. At δ_c the value $\Upsilon_c = 0.636(4)$ was measured already at $L = 64$, and larger volumes confirmed the agreement with eq. (25) [17]. This is one of the clearest pieces of numerical evidence that the BKT transition does occur, and that the corresponding quantitative predictions are valid.

Moreover, the corresponding jump in the superfluid density of thin films has been observed experimentally [11].

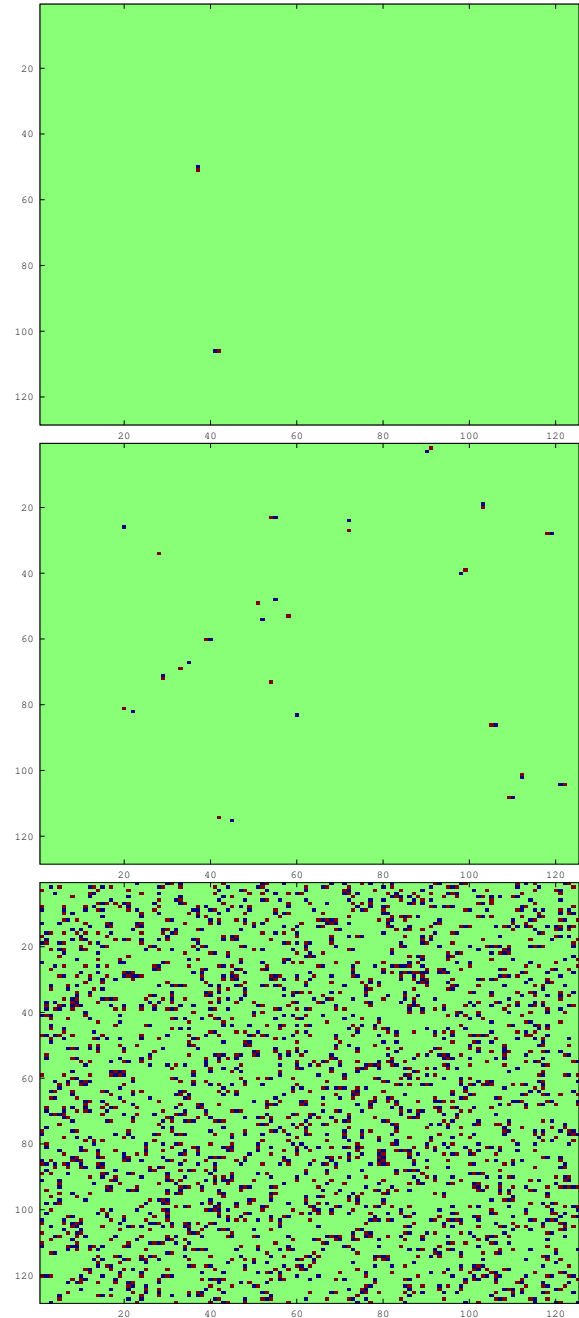


Figure 6. Maps of typical configurations of the XY model on a 128×128 lattice, with the constraint Hamilton function (22) and $\delta = 1.8, 1.9$ and 2.5 (from top to bottom). The presence of a V (AV) is indicated by a red (blue) plaquette. As long as there are only few V (for $\delta \leq 1.9$), the effect of V-AV pair formation is evident.

All this seems nicely consistent, but in some sense it is *puzzling*: in Section 2.2 we reviewed the consideration of energy *vs* entropy in the vortex picture, which predicts the BKT transition. This picture is standard, and it has been brought into further prominence by the Nobel Prize Committee. However, in the formulation with the constraint Hamilton function the energy cost for any V or AV is zero, but still the BKT transition is beautifully observed [16,17]. Is this a contradiction?

More to the point, we focus on the question: is the V–AV (un)binding mechanism still at work, even when free V and AV do not require any energy, but only the entropy effect is there?

A first hint is given by Fig. 6, which shows “maps” of the V and AV found in typical configurations at $\delta = 1.8, 1.9$ and 2.5.

For small δ , when only few V and AV show up, the trend to a V–AV pair formation is obvious. At $\delta = 2.5$ there are numerous topological defects, and it cannot be seen by eye whether or not such a trend persists.

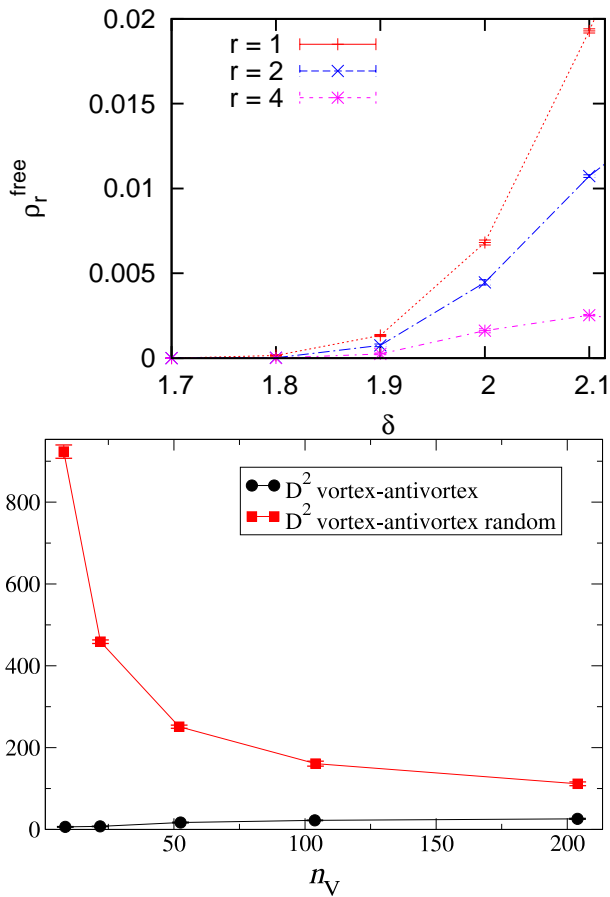


Figure 7. Top: The density of “free vortices”, ρ_r^{free} , i.e. of V or AV without an opposite partner within distance $r = 1, 2$ or 4. We see an onset at $\delta \geq \delta_c$, so ρ_r^{free} is similar to an (inverse) order parameter. Bottom: The mean distance squared between V–AV pairs, D^2 , for optimal pairing (black line). For small n_V (few vortices), D^2 is much shorter than the corresponding term for random distributed V and AV (red line). Around $n_V \geq 50$ (typical for $\delta \approx 1.9$) this striking discrepancy fades away. This confirms the V–AV (un)binding mechanism in the BKT transition.

In any case, Fig. 6 only shows specific configurations, but a conclusive answer requires a statistical analysis. Fig. 7 (top) shows the average density ρ_r^{free} of “free V” plus “free AV”, defined by the property that there is no opposite partner within distance r , with $r = 1, 2$ and 4. We see an onset around $\delta \approx 1.8$, and a sharp increase as δ exceeds 1.9. Hence ρ_r^{free} behaves indeed like an (inverse) “order parameter” for the BKT transition⁷ (although, strictly speaking, there is no ordering).

⁷The finite volume shifts the apparent critical angle somewhat up.

Fig. 7 (top) shows the mean distance squared between nearby V and AV cores, $d_{V,AV}^2$, in configurations with n_V vortices (and n_V anti-vortices), at $L = 128$,

$$D^2 = \frac{1}{n_V} \sum_{i=1}^{n_V} d_{V,AV,i}^2. \quad (26)$$

The V and AV pairs are formed such that D^2 is minimal. This is compared to D^2 for artificial configurations, where the same number of V and AV are random distributed over the volume. For small n_V — which corresponds to small δ — we see a striking difference for the configurations which are generated by simulating the model. This is clear evidence for a V–AV pair formation. This effect fades away for larger δ , when n_V increases ($\delta = 1.9$ corresponds to about $n_V = 50$).

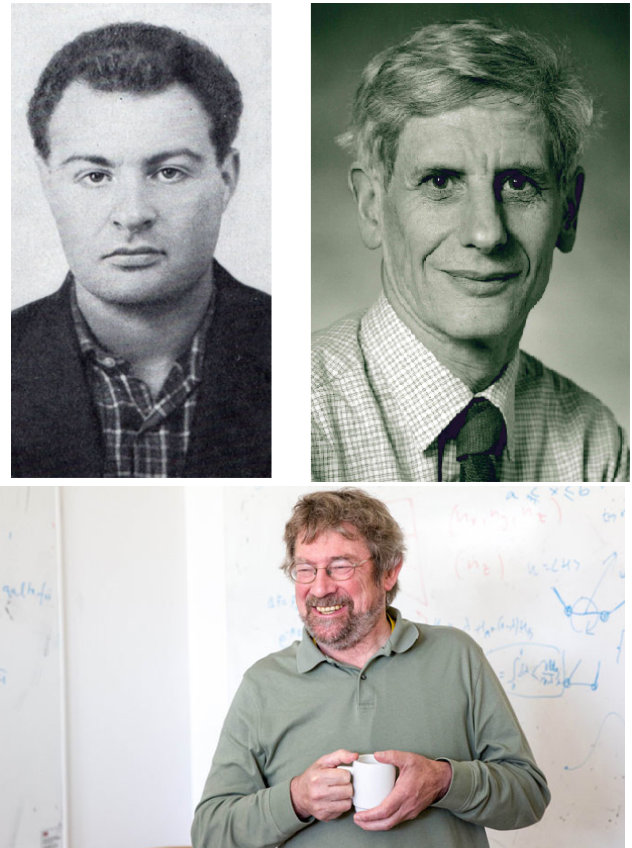


Figure 8. Top left: **Vadim L'vovich Berezinskii** (1935-1980) was born in Kiev (USSR) and graduated 1959 at Moscow State University. After working at the Textile Institute and the Research Institute for Heat Instrumentation, he joined 1977 the Landau Institute of Theoretical Physics in Moscow. Top right: **David James Thouless** was born 1934 in Bearsden (Scotland). He studied at Cambridge University as well, and graduated 1958 at Cornell University, his Ph.D. advisor was Hans Bethe. He worked in Birmingham with Rudolf Peierls, and later with John Kosterlitz. In 1980 he became Professor at the University of Washington in Seattle. Bottom: **John Michael Kosterlitz** was born 1942 in Aberdeen (Scotland), studied at Cambridge University, and graduated 1969 in Oxford. In 1974 he became Lecturer at Birmingham University, and in 1982 Professor at Brown University in Rhode Island, USA.

We conclude that the V–AV (un-)binding mechanism is at work, which confirms once more the elegant picture by Kosterlitz and Thouless for the BKT phase transition. This

observation even holds when topological defects do not cost any energy; then it is a pure entropy effect. Therefore the standard argument for this picture — outlined in Section 2.2 — should be extended.

III BEREZINSKII-KOSTERLITZ-THOULESS TRANSITION IN THE 2D XY MODEL

We now proceed to *quantum spin models*, leaving behind the classical spins (albeit they will be back in Section 3.1). Now the components of a spin vector are Hermitian *operators*, for spin 1/2 they can be represented by the Pauli matrices. For any spin, $s = 1/2, 1, 3/3, 2, 5/2 \dots$ (in natural units, $\hbar = 1$), we write them as \hat{S}_x^a , where x is still a lattice site. These components obey the familiar relations

$$\sum_{a=1}^3 \hat{S}_x^a \hat{S}_x^a = s(s+1), \quad [\hat{S}_x^a, \hat{S}_y^b] = i \delta_{xy} \epsilon^{abc} \hat{S}_x^c, \quad (27)$$

where ϵ is the Levi-Civita symbol. If we compare these terms at large s , we see that the commutator is suppressed as $O(s) \ll O(s^2)$, and the spin appears almost classical.

For arbitrary spin we assemble the *Hamilton operator* \hat{H} , and write down the partition function

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle xy \rangle, a} \hat{S}_x^a \hat{S}_y^a, \quad Z = \text{Tr} e^{-\hat{H}/T}. \quad (28)$$

It is analogous to the Hamilton function (2) and partition function (3), now with quantum spins. We recognize a global SU(2) symmetry; its transformation is performed on each component \hat{S}_x^a .

In addition, this framework differs from the previous sections in the following points:

- We focus on *spin chains*, i.e. dimension $D = 1$, so now the sites are located on a line.
- We consider *anti-ferromagnets*, with $J < 0$, cf. footnote 1.
- We skip the external magnetic field.
- We drop the additive constant (“cosmological constant”) of the Hamilton function (2). This change is irrelevant — what matters are solely energy *differences*.

For commutative spin components it would be trivial to write down a ground state of such an anti-ferromagnetic spin chain: it consists of spins of opposite orientations, in alternating order (say $|s, -s, s, -s, s, -s \dots\rangle$) known as a Néel state. However, this is not an eigenstate of \hat{H} . Quantum spins are far more complicated, and identifying a ground state is a formidable task, even in $d = 1$.

The investigation of these systems has a history of almost 100 years. The ongoing interest has been fueled by the fact that quantum spin chains exist experimentally; we will give examples below. A breakthrough was achieved by Hans

Bethe in 1931, who constructed the ground state for spin $s = 1/2$ [21].

Of course also excited states are of interest, and in particular the question whether or not there is a finite energy gap $\Delta_s = E_1 - E_0$. We repeat that a finite gap corresponds to a massive phase, with a correlation length $\xi = 1/\Delta_s$.

In the 1950s and 1960s such systems were studied mostly with “spin wave theory”, an approach which was fashion at that time. It predicts a “quasi long-range order” (without Nambu-Goldstone bosons), which means a power decay of the correlation function, i.e. the massless case with $\xi = \infty$. This was elaborated mostly in higher dimensions, $d \geq 2$, doubts remained about the spin chain.

For $D = 1$, the expected zero gap for $s = 1/2$ was proved in 1961 by the Lieb-Schultz-Mattis Theorem [22]. This consolidated the paradigm that anti-ferromagnetic quantum spin chains are always gapless, for any spin $s = 1/2, 1, 3/2 \dots$.

Therefore it came as a great surprise when *F. Duncan M. Haldane* (born 1951 in London) contradicted in 1983 [23, 24]. According to the *Haldane Conjecture*, the paradigm was correct only for the half-integer spins, but not for $s \in \mathbb{N}$. He conjectured

$$\begin{aligned} s = 1/2, 3/2, 5/2 \dots & \text{ (half-integer) } \Delta_s = 0 \text{ gapless} & (29) \\ s = 1, 2, 3 \dots & \text{ (integer) } \Delta_s > 0 \text{ finite gap.} \end{aligned}$$

Haldane gave topological arguments, which were considered as somewhat cryptic, hence they were initially met with skepticism. We refrain from an attempt to review them, here we refer to Ref. [25].

The zero gap for all half-integer spins was rigorously proved three years later [26], extending the Lieb-Schultz-Mattis Theorem.

The surprising part of this conjecture, which refers to integer spins, was soon supported by numerical studies for $s = 1$ [27]. Later the existence of a gap $\Delta_1 > 0$ was proved in Ref. [28], and its value was established to high precision in the early 1990s [29]. A study based on the diagonalization of an $L = 22$ spin chain, and a large L extrapolation, obtained $\Delta_1 = 0.41049(2)J$ [30].

This is in agreement with *experimental* studies. In particular, the material CsNiCl₃ contains quasi-1d anti-ferromagnetic $s = 1$ spin chains. The scattering of polarized neutrons leads to a multi-peak structure, from which the value $\Delta_1 \approx 0.4 J$ could be extracted [31]. Similar observations were made with Ni(C₂H₈N₂)₂NO₂ClO₄ [32], but no gap was found in materials with $s = 1/2$ spin chains [33].

For higher $s \in \mathbb{N}$, it is difficult to observe such a gap: it has a conjectured extent $\Delta_s \sim \exp(-\pi s)$ [34], so it becomes tiny for increasing s . The case $s = 2$ is still tractable numerically: a study up to $L = 350$ arrived at $\Delta_2 = 0.085(5)J$ [35].

In summary, the Haldane Conjecture (30) has been proved rigorously for all half-integer spins, and for $s = 1$. Numerical

and experimental results for the value of Δ_1 agree. For $1 < s \in \mathbb{N}$ we have the conjecture, and specifically for $s = 2$ also numerical evidence.

III.1 Mapping onto the 2D O(3) model

A new perspective occurred by mapping such anti-ferromagnetic quantum spin chains onto the 2D O(3) model, or Heisenberg model. This latter emerged as a low energy effective theory, which was constructed by a large- s expansion, and its validity was conjectured for all s [24, 36], for a review see Ref. [37].

Thus we are back with a classical spin model of Section 1. We write its Hamilton function in continuum notation,

$$\begin{aligned} \frac{1}{T} \mathcal{H}[\vec{e}] &= \int d^2x \left[\frac{1}{2g} \partial_\mu \vec{e} \cdot \partial_\mu \vec{e} - \frac{\theta}{8\pi} i \epsilon_{\mu\nu} \vec{e} \cdot (\partial_\mu \vec{e} \times \partial_\nu \vec{e}) \right] \quad (30) \\ &= \frac{1}{T} \mathcal{H}_0 - i\theta Q[\vec{e}]. \end{aligned}$$

The 3-component classical spin field $\vec{e}(x)$ has the form that we wrote down for the Heisenberg model (below eq. (2)). The term \mathcal{H}_0 is just a continuum version of the form (2) at $\vec{H} = \vec{0}$, up to the notation for the coupling constant. At large spin s , the (approximately classical) spin \vec{S} can be written as $\vec{S} \approx s\vec{e}$, still with the convention $|\vec{e}| = 1$, which leads to a weak coupling $g \approx T/(Js^2)$.

The important novelty is the θ -term: its integrated form, $Q[\vec{e}]$, counts how many times the configuration $[\vec{e}]$ covers the sphere S^2 in an oriented manner. Hence it is an integer, namely the *topological charge*, or *winding number*, $Q[\vec{e}] \in \mathbb{Z}$.⁸ Therefore $\exp(-\mathcal{H}/T)$ is 2π -periodic in θ , so it is sufficient to consider $0 \leq \theta < 2\pi$.

The Haldane-Affleck map of a anti-ferromagnetic quantum spin chain onto this model relates the quantum spin s to the *vacuum angle* θ as $\theta = 2\pi s$ (within the large s construction) [24, 36, 37]. Taking into account the 2π -periodicity in θ , this amounts to the scheme

		Haldane Conjecture
s integer	$\theta = 0$	gap
s half-integer	$\theta = \pi$	gapless

Under this mapping, the Haldane Conjecture takes a new turn. It is remarkable that the mysterious part flips to the other side: the gap for the 2D O(3) model without a θ -term is well established, see e.g. Refs. [38]. On the other hand, it is hard to verify whether the limit $\theta = \pi$ is indeed gapless. If the mapping were rigorous, we could conclude that everything is accomplished, but of course it is another conjecture. Hence the challenge is to investigate the case $\theta = \pi$.

Perturbation theory does not help (cf. footnote 8), so *Ian Affleck* (born 1952 in Vancouver) suggested a

⁸For small variations of the trivial configuration $\vec{e}(x) = \vec{0}$ we always obtain $Q[\vec{e}] = 0$, so the θ -term is not visible in the field equations of motion, nor in perturbation theory (expansion in powers of g). Still, it does affect the actual physics, which is non-perturbative (finite g).

non-perturbative topological picture [34], along the lines of our consideration in Section 2. Affleck starts from \mathcal{H}_0 and adds an auxiliary potential term $\sim \mu^2 (e^{(3)}(x))^2$, which pushes the field \vec{e} into the $(e^{(1)}, e^{(2)})$ -plane; in the limit $\mu^2 \rightarrow \infty$ we are back with the 2d XY model. We call φ the angle within this preferred plane (as before), and α the (suppressed) angle out of it.

Let us consider a sub-volume, where the configuration contains a V or an AV in the preferred plane. Its contribution to the topological charge Q is given by the vorticity computed in eq. (14), using assumption (13) and Stokes' Theorem, but now normalized by the area of S^2 ,

$$q = \frac{1}{4\pi} \oint d\vec{x} \cdot \vec{\nabla} \varphi(x) = \pm \frac{1}{2}. \quad (31)$$

Local topological defects of this kind, with $q = 1/2$ and $q = -1/2$, are denoted as *merons* and *anti-merons*, respectively.

The energy estimate is similar to eq. (17), in particular we still obtain the factor $\ln L/a$ (we now write explicitly a "lattice spacing" a). The large L limit only allows for configurations with total vorticity 0, as before, but it permits meron-anti-meron pairs (cf. eq. (18)). At the end we have to remove the auxiliary potential, $\mu^2 \rightarrow 0$; then the merons and anti-merons can easily avoid the UV divergence in the core, by choosing spin directions out of the previously preferred plane.

Hence we arrive at a picture, which allows for numerous merons and anti-merons, which diffuse the long-range order, and the energy gap occurs. In addition to the meron-anti-meron pairs, there can be an excess of one type by an even number, such that $Q = (n_{\text{meron}} - n_{\text{anti-meron}})/2 \in \mathbb{Z}$. However, the meron-anti-meron pairs are mainly responsible for the energy gap.

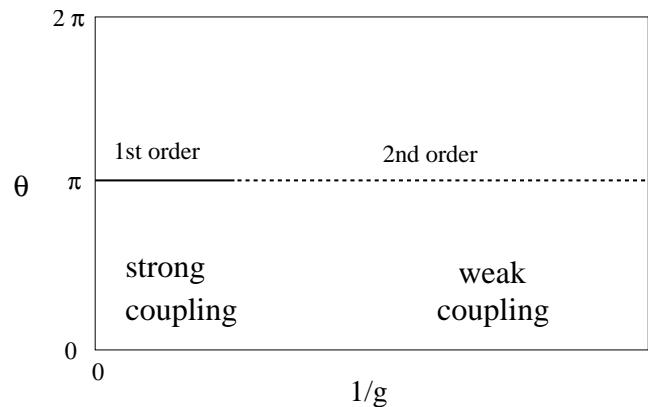


Figura 9. The expected phase diagram of the 2d O(3) model with a topological θ -term. At weak coupling, the map from anti-ferromagnetic quantum spin chains, along with Haldane's Conjecture, predicts a finite energy gap at $\theta = 0$, but a gapless second order phase transitions for $\theta \rightarrow \pi$.

So far this is the picture for $\theta = 0$. If we now include a vacuum angle θ , we see from eqs. (30), (31) that this attaches to each region with a meron (anti-meron) a factor $\exp(\pm i\theta/2)$. Therefore any sub-volume with an

meron–anti-meron pair picks up a factor $\cos(\theta/2)$, and in particular $\theta = \pi$ “neutralizes” all these pairs: they do not appear in $\exp(-\mathcal{H}/T)$, so they cannot diffuse the long-range order anymore, and the gap vanishes.

This picture refers to rather smooth configurations, which dominate at weak coupling, *i.e.* at small g . This is the framework of the effective low energy theory [24,36], and we also mentioned that the mapping at large s leads to a small $g \propto 1/s^2$. For the other extreme, $g \gg 1$, Seiberg reported a cusp in the free energy, which signals a first order phase transition, at $\theta = \pi$ [39].

Taking these conjectures together, we arrive at the expected phase diagram shown in Fig. 9. In particular, if we fix a small (or moderate) g , we should run into a second order phase transition, and therefore into a continuum limit, for $\theta \rightarrow \pi$.

A subtle study in Ref. [40] made this interesting feature quantitative. To this end, it related the 2d O(3) model at $\theta \approx \pi$, at low energy, to a model of conformal field theory, known as the $k = 1$ Wess-Zumino-Novikov-Witten model (k is the central charge) [41], see also Ref. [42]. Assuming both to be in the same universality class (cf. Section 1), the asymptotic behavior of the mass gap was derived as

$$\xi^{-1}(\theta \approx \pi) \propto \frac{|\theta - \pi|^{2/3}}{|\ln|\theta - \pi||^{1/2}}. \quad (32)$$

In a finite volume $L \times L$, this translates further into a finite size scaling of the magnetic susceptibility χ_m (given in eq. (10)), and the topological susceptibility $\chi_t = (\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2)/V$: they are both predicted to exhibit a dominant scaling $\propto L$, which is characteristic for a second order phase transition; for a (more abrupt) first order transition one would expect susceptibilities $\propto L^2$. The conjectured form, refined by logarithmic corrections, reads

$$\chi_m = L \sqrt{\ln L} g_m(L/\xi), \quad \chi_t = \frac{L}{\sqrt{\ln L}} g_t(L/\xi), \quad (33)$$

where g_m and g_t are “universal functions” with respect to variations of L and ξ .

This is an explicit prediction, to be verified in order to check the above conjecture about a second order phase transitions for $\theta \rightarrow \pi$. The way to study effects beyond perturbation theory, from first principle, are numerical Monte Carlo simulations of the lattice regularized model (we recall footnote 5 and Refs. [4]). Its idea is to generate numerous random configurations with probability $p[\vec{e}] \propto \exp(-\mathcal{H}[\vec{e}]/T)$, cf. eq. (3). A large set of such configurations enables the numerical measurement of expectation values of the physical terms.

This is straightforward for \mathcal{H}_0 , but as soon as we include $\theta \neq 0$, \mathcal{H} and $\exp(-\mathcal{H}/T)$ become complex, so they do not define a probability anymore. We could generate the configurations using $|\exp(-\mathcal{H}[\vec{e}]/T)|$, and include a complex phase *a posteriori* by re-weighting the statistical entries. This is correct in principle, but the re-weighting involves lots of cancellations, hence a reliable measurement requires a huge statistics — the required number of configurations grows

exponentially with the volume V . This is the notorious *sign problem*.



Figura 10. **Frederick Duncan Michael Haldane** (top), was born 1951 in London and studied at Cambridge University, where he graduated in 1978. After working at the University of Southern California, the Bell Laboratories and the University of California, San Diego, he became Eugene Higgins Professor at Princeton University in 1990. **Ian Keith Affleck** (bottom) was born 1952 in Vancouver, studied at Trent University (in Ontario, Canada), and graduated 1979 at Harvard University, his Ph.D. advisor was Sidney Coleman. He worked at Princeton University and Boston University, and since 2003 he is Killam Professor at the University of British Columbia in Vancouver.

In most cases where this problem occurs, in particular in QCD at high baryon density, and also in QCD with a θ -term, it has prevented reliable numerical results. However, in the case of the 2D O(3) model, this problem was overcome thanks to the exceptionally powerful *meron cluster algorithm* [43], applied to the constraint Hamilton function (22) at $\delta = 2\pi/3$.

This algorithm divides the lattice volume into connected sets of spin variables \vec{e}_x , the *clusters*, which are updated collectively [44]. This approach provides huge statistics (including many configurations that do not need to be generated explicitly). Hence in this exceptional case, conclusive numerical results were obtained, and they clearly confirmed the predicted large- L scaling of eq. (33), including the $\ln L$ refinement [43].

In addition, the algorithm also assigns an integer or half-integer topological charge q to each cluster (they sum up

to the topological charge $Q \in \mathbb{Z}$ of the entire configuration). At weak coupling, most clusters are neutral ($q = 0$), and a few percent carry charge $q = \pm 1/2$ (higher charges are very seldom). At this point, we return to Affleck's picture, and interpret the clusters with $q = 1/2$ ($-1/2$) as merons (anti-merons). Then the picture of pair neutralization appears in a new light: now it is stochastic, and it does not require any $O(3)$ symmetry breaking (unlike the potential $\sim \mu^2(e^{(3)})^2$). Hence it confirms the result for the second order phase transition, and it even endows the heuristic picture with a neat stochastic interpretation.

IV CONCLUSIONS

We described the concept of classical and quantum spin models, the framework of the 2016 Physics Nobel Prize. We addressed aspects related to topology, *i.e.* to quantities which are invariant under (most) small deformations, and which can only change in discrete jumps. We referred to low dimensions, $D = 1$ and 2 , where thermal fluctuations prevent the dominance of ordered structures, and therefore spontaneous symmetry breaking, but smooth phase transitions happen nevertheless.

In the classical 2D XY model we described the BKT phase transition [9], which is essential (of infinite order), and driven by the (un)binding of vortex-anti-vortex pairs. This transition has been observed experimentally, for instance in superfluids [11] and in superconductors [12], and recently also in systems of ultra-cold atoms trapped in optical lattices [45].

Then, we summarized the history of anti-ferromagnetic quantum spin chain studies, in particular the Haldane Conjecture [23, 24] about energy gaps for integer spin vs. gapless chains for half-integer spin. This insight agrees with experimental results as well [31, 32]. We further discussed the mapping onto a classical 2D $O(3)$ model with a topological θ -term (the Haldane-Affleck map [24, 36]), and the manifestation of the Haldane Conjecture in that system.

These are only selected topics of the works, which were awarded with the Physics Nobel Prize 2016. For a review of aspects which have not been covered here — in particular the quantum Hall effect and topological insulators — we refer to Ref. [46].

ACKNOWLEDGEMENTS

We thank Michael Bögli, Ferenc Niedermayer, Michele Pepe, Andrei Pochinsky, Fernando G. Rejón-Barrera and Uwe-Jens Wiese for their collaboration in projects related to the BKT transition and the Haldane conjecture. This work was supported by the Albert Einstein Center for Theoretical Physics, the European Research Council under the European Union's Seventh Framework Programme (FP7/2007-2013)/ ERC grant agreement 339220, the Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) through project CB-2013/222812, and by DGAPA-UNAM, grant

IN107915.

REFERENCES

- [1] S.-K. Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena* (Addison-Wesley Publishing, 1976).
- [2] P. Pfeuty and G. Toulouse, *Introduction to the Renormalization Group and to Critical Phenomena* (John Wiley and Sons, 1977).
D.J. Amit, *Field Theory, the Renormalization Group and Critical Phenomena* (McGraw-Hill, 1978).
I. Herbut, *A Modern Approach to Critical Phenomena* (Cambridge University Press, 2007).
- [3] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena* (Clarendon Press, Oxford, 2002).
- [4] I. Montvay and G. Münster, *Quantum Fields on a Lattice* (Cambridge University Press, 1994).
W. Bietenholz, *Int. J. Mod. Phys. E* 25, 1642008 (2016).
- [5] E. Ising, *Zeitschrift für Physik* 31, 253 (1925).
- [6] R. Peierls, *Proc. Cambridge Phil. Soc.* 32, 477 (1936).
L. Onsager, *Phys. Rev.* 65, 117 (1944).
- [7] V.L. Berezinskii, *Sov. Phys. JETP* 32, 493 (1971); *Sov. Phys. JETP* 34, 610 (1972).
- [8] A.A. Abrikosov, L.P. Gor'kov, I.E. Dzyaloshinskii, A.I. Larkin, A.B. Migdal, L.P. Pitaevskii and I.M. Khalatnikov, *Soviet Physics Uspekhi* 24, 249 (1981).
- [9] J.M. Kosterlitz and D.J. Thouless, *J. Phys. C* 5, L124 (1972); *J. Phys. C* 6, 1181; (1973); *J. Phys. C* 7, 1046 (1974).
- [10] F. Wegner, *Zeitschrift für Physik* 206, 465 (1967).
- [11] D.J. Bishop and J.D. Reppy, *Phys. Rev. Lett.* 40, 1727 (1978).
- [12] A.F. Hebard and A.T. Fiory, *Phys. Rev. Lett.* 44, 291 (1980).
K. Epstein, A.M. Goldman and A.M. Kadin, *Phys. Rev. Lett.* 47, 534 (1981).
D.J. Resnick, J.C. Garland, J.T. Boyd, S. Shoemaker and R.S. Newrock, *Phys. Rev. Lett.* 47, 1542 (1981).
- [13] J.M. Kosterlitz, *J. Phys. C* 7, 1046 (1974).
- [14] M. Hasenbusch, *J. Phys. A* 38, 5869 (2005).
- [15] W. Bietenholz, U. Gerber, M. Pepe and U.-J. Wiese, *JHEP* 1012, 020 (2010).
- [16] W. Bietenholz, M. Bögli, F. Niedermayer, M. Pepe, F.G. Rejón-Barrera and U.-J. Wiese, *JHEP* 1303, 141 (2013).
- [17] W. Bietenholz, U. Gerber and F.G. Rejón-Barrera, *J. Stat. Mech.* 1312, P12009 (2013).
- [18] D.R. Nelson and J.M. Kosterlitz, *Phys. Rev. Lett.* 39, 1201 (1977).
- [19] N.V. Prokof'ev and B.V. Svistunov, *Phys. Rev. B* 61, 11282 (2000).
- [20] P. Olsson and P. Holme, *Phys. Rev. B* 63, 052407 (2001).
- [21] H.A. Bethe, *Zeitschrift für Physik* 71, 205 (1931).
- [22] E.H. Lieb, T. Schultz and D. Mattis, *Ann. Phys. NY* 16, 407 (1961).
- [23] F.D.M. Haldane, *Phys. Lett. A* 93, 464 (1983); *J. Appl. Phys.* 75, 33 (1985).
- [24] F.D.M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* 50, 1153 (1983).

- [25] E. Fradkin, *Field Theories of Condensed Matter Physics* (Cambridge University Press, 2013).
- [26] I. Affleck and E.H. Lieb, *Lett. Math. Phys.* 12, 57 (1986).
- [27] R. Botet, R. Jullien and M. Kolb, *Phys. Rev. B* 28, 3914 (1983).
J.B. Parkinson and J.C. Bonnet, *Phys. Rev. B* 27, 4703 (1985).
M.P. Nightingale and H.W.J. Blöte, *Phys. Rev. B* 33, 659 (1986).
- [28] I. Affleck, T. Kennedy, E.H. Lieb and H. Tasaki, *Phys. Rev. Lett.* 59, 799 (1988).
- [29] S.R. White and R.M. Noack, *Phys. Rev. Lett.* 68, 3487 (1992).
- [30] O. Golinelli, Th. Jolicœur and R. Lacaze, *Phys. Rev. B* 50, 3037 (1994).
- [31] W.J.L. Buyers, R.M. Morra, R.L. Armstrong, M.J. Hogan, P. Gerlach and K. Hirakawa, *Phys. Rev. Lett.* 56, 371 (1986).
M. Steiner, K. Kakurai, J.K. Kjems, D. Petitgrand and R. Pynn, *J. Appl. Phys.* 61, 3953 (1987).
R.M. Morra, W.J.L. Buyers, R.L. Armstrong and K. Hirakawa, *Phys. Rev. B* 38, 543 (1988).
M. Kenzelmann, R.A. Cowley, W.J.L. Buyers, Z. Tun, R. Coldea and M. Enderle, *Phys. Rev. B* 66, 024407 (2002).
- [32] J.P. Renard, M. Verdaguer, L.P. Regnault, W.A.C. Erkelens, J. Rossat-Mignod and W.G. Stirling, *Europhys. Lett.* 3, 945 (1987).
- [33] C.P. Landee and M.M. Turnbull, *Eur. J. Inorg. Chem.* 2013, 2266 (2013).
- [34] I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.* 56, 408 (1986); *J. Phys. Condens. Matter* 1, 3047 (1989).
- [35] U. Schollwöck and Th. Jolicœur, *Europhys. Lett.* 30, 493 (1995).
- [36] I. Affleck, *Nucl. Phys. B* 257, 397 (1985).
- [37] I. Affleck, in *Fields, Strings and Critical Phenomena*, Proceedings of the Les Houches Summer School, Session XLIX, edited by E. Brézin and J. Zinn-Justin (1988) p. 563.
- [38] A.M. Polyakov, *Phys. Lett. B* 59, 79 (1975).
P. Hasenfratz, M. Maggiore and F. Niedermayer, *Phys. Lett. B* 245, 522 (1990).
- [39] N. Seiberg, *Phys. Rev. Lett.* 53, 637 (1984).
- [40] I. Affleck, D. Gepner, H.J. Schulz and T. Ziman, *J. Phys. A* 22, 511 (1989).
- [41] S.P. Novikov, *Sov. Math. Dokl.* 24, 222 (1981); *Usp. Math. Nauk.* 37, 3 (1982).
E. Witten, *Commun. Math. Phys.* 92, 455 (1984).
- [42] R. Shankar and N. Read, *Nucl. Phys. B* 336, 457 (1990).
- [43] W. Bietenholz, A. Pochinsky and U.-J. Wiese, *Phys. Rev. Lett.* 75, 4524 (1995).
- [44] U. Wolff, *Phys. Rev. Lett.* 62, 361 (1989).
- [45] Z. Hadzibabic, P. Krüger, M. Cheneau, B. Battelier and J. Dalibard, *Nature* 441, 1118 (2006).
- [46] O. de Melo, "Premio Nobel de Física de 2016: efecto Hall cuántico y aislantes topológicos", to appear in *Rev. Cub. Fis.* (this issue).

FORMACIÓN DOCTORAL FRANCIA-CUBA EN FÍSICO-QUÍMICA MOLECULAR: 10 AÑOS DE UNA EXPERIENCIA EXITOSA

FRENCH-CUBAN DOCTORAL TRAINING IN MOLECULAR CHEMICAL-PHYSICS: 10 YEARS OF A SUCCESSFUL EXPERIENCE

M. L. GONZÁLEZ-MARTÍNEZ^{a†}, P. LARRÉGARAY^b, J. RUBAYO-SONEIRA^c y J.-C. RAYEZ^b

a) CNRS, Laboratoire Aimé Cotton, UPR 3321, F-91400 Orsay; maykel.gonzalez-martinez@u-psud.fr

b) Université de Bordeaux, CNRS, ISM, UMR 5255, F-33400 Talence, France. pascal.larregaray@u-bordeaux.fr; jc.rayez@u-bordeaux.fr

c) InSTEC, Ave. Salvador Allende y Luaces, Plaza de la Revolución, La Habana, Cuba; jrs@instec.cu

† autor para la correspondencia

Recibido 19/10/2016; Aceptado 28/10/2016

Durante la última década se han establecido fuertes relaciones entre investigadores cubanos y franceses en el dominio de la físico-química molecular. Estas relaciones, erigidas sobre la realización de proyectos de doctorado conjuntos, se han construido fuera de los programas bilaterales tradicionales, gracias a la enérgica implicación de investigadores del Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC, La Habana), varios laboratorios franceses de investigación (Bordeaux, Toulouse, Lille, Orsay, Le Havre, Besançon) y el apoyo decisivo de la Embajada de Francia en Cuba. Los trabajos realizados, que abarcan desde el estudio de propiedades de moléculas aisladas hasta la reactividad en fase condensada, se han beneficiado del alto nivel de la formación universitaria cubana en física y química. La colaboración ha sido mutuamente fructífera en términos de formación—11 grados de doctor han sido entregados hasta la fecha—e investigación—se han publicado varias decenas de artículos científicos en revistas de alto impacto. Este artículo relata la génesis, evolución y perspectivas actuales de esta colaboración, a la luz de la evolución futura de las relaciones académicas franco-cubanas.

Strong academic relations have been established over the last decade between Cuban and French researchers in the field of molecular chemical-physics. This collaboration, founded on joint PhD projects, have been developed outside traditional bilateral programmes thanks to the energetic involvement of researchers from Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC, Havana), several French research labs (Bordeaux, Toulouse, Lille, Orsay, Le Havre, Besançon) and the decisive support of the French Embassy in Cuba. The resulting research projects, whose subjects span from the study of the properties of isolated molecules to that of chemical reactivity in the condensed phase, have greatly benefitted from the excellent level of Cuban higher education in physics and chemistry. The collaboration have been mutually advantageous both in terms of the number of graduates—11 PhD degrees have been awarded to date—and research quality—various tens of scientific articles have been published in high-impact peer-reviewed journals. Here, we trace the origins, and discuss the evolution and current perspectives of this collaboration, on the light of future French-Cuban academic relations.

PACS: Physics literature and publication, 01.30.-y. science and government (funding, politics, etc.), 01.78.+p; Theoretical and experimental chemical physics.

I. DEL ENCUENTRO A LA COLABORACIÓN

En el período 1960-90 la investigación y formación doctoral cubanas en ciencias exactas se nutrieron principalmente de la intensa colaboración con la Unión Soviética (URSS) y los países socialistas de Europa del Este, principalmente a través de programas de intercambio. Estos programas permitieron formarse en centros de punta a numerosos estudiantes y jóvenes investigadores cubanos. El Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC, La Habana), fue concebido en la década de los 80 para la formación de los profesionales de perfil nuclear (físicos nucleares, radioquímicos e ingenieros nucleares) que trabajarían en la primera central electronuclear cubana, que era construida en Juraguá, Cienfuegos, en estrecha colaboración con la URSS y empleando tecnología soviética. La caída del campo socialista puso fin a la construcción de la central y frenó considerablemente la colaboración científica cubana con el extranjero, afectando dramáticamente el sistema de formación académico de la isla.

Varios profesores-investigadores del InSTEC, con el interés de ampliar las competencias de sus estudiantes y diversificar las líneas de investigación del instituto, se reunieron para formar un equipo de investigación en física atómica y molecular.

Desde su creación, el equipo decidió poner en práctica un esquema de formación doctoral que completase la carrera académica de los estudiantes especializados en física nuclear, para lo que se juzgó esencial que los jóvenes investigadores interactuasen con la comunidad científica internacional. Con el objetivo de propiciar dicha interacción, así como catalizar la colaboración entre investigadores cubanos y extranjeros en general, se organizó en La Habana en 2000 la primera edición del congreso *International Meeting on Photodynamics (and Related Aspects)*. El éxito fue inmediato y la experiencia devino en un ciclo periódico de conferencias con ciclo bianual. La participación de investigadores franceses fue muy destacada desde la primera edición, así como en las cinco ediciones siguientes también organizadas en Cuba. Para potenciar adicionalmente el intercambio directo entre los estudiantes

cubanos e investigadores extranjeros, se organizaron escuelas pre-conferencia a partir de la tercera edición—en 2004, 2006, 2008 y 2010. Varios investigadores procedentes de instituciones francesas (Alberto Beswick, Jean-Claude Rayez,

Laurent Bonnet, John Weiner) impartieron cursos avanzados directamente relacionados con sus líneas de investigación en dichas escuelas, a través de los cuales establecieron contactos con estudiantes cubanos.

Tabla 1. Los actores de la cooperación desde 2006.

<p>Esta colaboración no habría podido ver la luz del día y perdurar toda una década sin el trabajo imponderable de un gran número de estudiantes, investigadores, profesores y otro personal del InSTEC, de varias universidades francesas y de la Embajada de Francia en Cuba. Todas estas personas son afectuosamente agradecidas a continuación:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Estudiantes co-dirigidos: Maykel L. González Martínez, Llinersy Uranga Piña, Ricardo Franklin Mergarejo, Rolando R. Lozada García, Ernesto L. Quintas Sánchez, Alejandro Rivero Santamaría, Yansel O. Guerrero Martínez, Wilmer Arbelo González, Otoniel Denis Alpizar, Mario Hernández Vera, Carlos García Fernández, Alejandro Gutiérrez Quintanilla, Ariel F. Pérez Mellor; - InSTEC: Jesús Rubayo Soneira, Germán A. Rojas Lorenzo, Fernando Guzmán Martínez; - Universidad de Bordeaux: Jean-Claude Rayez, Laurent Bonnet, Pascal Larrégaray, Cédric Crespos, Thierry Stoecklin, Philippe Halvick; - Universidad de Toulouse: Nadine Halberstadt, Christof Meier, Alberto Beswick; - Universidad de Lille: Maurice Monnerville, Valérie Vallet; - Universidad Paris-Sud: Claudine Crépin, Anne Zehnacker-Rentien; - Universidad de Le Havre: François Lique; - Universidad de Franche-Comté: Sylvain Picaud; - Servicio de Cooperación y de Acción Cultural de la Embajada de Francia en Cuba: Roland Navarro, François Sow, Bernard Grau, Françoise Cochaud, Servane Tarot, Aurélie Nogues, Matthieu Sette, Christian Estrade.
--

Havana, February 1 - 5, 2010

Pre-conference School, January 27-30, 2010



Figura 1. Logotipo del congreso 6th International Meeting on Photodynamics (and Related Aspects) (arriba) y fotografía del edificio principal del InSTEC, La Habana (abajo).

Desde principios de los 2000, los numerosos intercambios hicieron evidente el potencial de una colaboración basada en la complementariedad de la formación universitaria cubana en física, de alta calidad, y la investigación

académica francesa. Rápidamente se consideró la realización de doctorados en cotutela. Sin embargo, semejante proyecto no se habría podido llevar a cabo sin el apoyo decisivo del Servicio de Cooperación y Acción Cultural de la Embajada de Francia en Cuba. El primer doctorado en cotutela, que debutó en 2006 entre el InSTEC y la Universidad de Bordeaux, fue el verdadero desencadenante de la cooperación franco-cubana en físico-química molecular. Las universidades de Toulouse y Paris-Sud se unieron a la aventura desde 2007, seguidas rápidamente por las de Lille, Orsay, Le Havre y Franche-Comté (Besançon) en 2008. Debe subrayarse que, debido a la ausencia de acuerdos bilaterales entre Francia y Cuba, dichas relaciones se establecieron fuera de los marcos tradicionales de la cooperación académica internacional. Por este motivo, el esfuerzo ininterrumpido de diversos actores (universidades, Embajada de Francia en Cuba) fue un elemento fundamental en el nacimiento de dicha cooperación, principalmente para asegurar el financiamiento y movilidad de los estudiantes en Francia. Los actores de la colaboración son citados en la Tabla 1.

II. LA FÍSICO-QUÍMICA MOLECULAR FRANCO-CUBANA

Durante sus estudios universitarios, los estudiantes del InSTEC reciben una profunda preparación académica en matemáticas, física, química y ciencias de la computación, resultado de los años de intercambio con la escuela teórica soviética. Los estudiantes vinculados al grupo de investigación liderado por el Prof. Jesús Rubayo Soneira reciben, además, una especialización en física atómica y molecular durante sus estancias de investigación, tesis de licenciatura y maestría. En particular, producto de la génesis del grupo cubano y su colaboración con grupos españoles expertos en estos temas, los

estudiantes adquieren experiencia en métodos (cuasi)clásicos y cuánticos, principalmente para el estudio de procesos foto-inducidos de dinámica molecular. Estas condiciones, así como el origen mismo de los vínculos entre el grupo cubano e investigadores franceses a raíz de la participación regular de los últimos en las conferencias de Fotodinámica organizadas en Cuba, han determinado las temáticas y métodos empleados en los trabajos doctorales de investigación en cotutela desde 2006.

La Tabla 2 muestra detalles sobre las 11 tesis doctorales defendidas hasta la fecha por estudiantes cubanos en el contexto de la colaboración con varias instituciones francesas, incluyendo los títulos, disciplinas, fechas de defensa, etc. Los trabajos han abordado una amplia gama de

temáticas de la físico-química moderna, desde el estudio de moléculas aisladas de interés en procesos medioambientales y astrofísicos (e.g., colisiones inelásticas y reactivas, dinámica de foto-excitación), el análisis de interfases (recombinación en superficies) y de sistemas en fase condensada (matrices criogénicas). La mayoría de los doctorados conjuntos han desarrollado estudios teóricos, pero también se ha finalizado un doctorado experimental y hay dos actualmente en marcha. Las características de las becas de doctorado en cotutela, que incluyen generalmente estancias máximas de alrededor de 6 meses por año en los laboratorios franceses, complican la realización de doctorados experimentales. Además, la complejidad y el costo de instalaciones experimentales ha incidido negativamente en la formación de los estudiantes cubanos en técnicas experimentales modernas y en el desarrollo de la físico-química experimental en Cuba.

Tabla 2. Los actores de la cooperación desde 2006.

Estudiante <i>Disciplina</i>	Título de la tesis	Universidad francesa, Laboratorio <i>Supervisores en Francia</i>	Fecha de la defensa
M. L. González Martínez <i>Química-física</i>	Approches statisticodynamiques de la réactivité chimique	Université Bordeaux I, Institut des Sciences Moléculaires, <i>L. Bonnet, P. Larrégaray, J.-C. Rayez</i>	28/01/10
Ll. Uranga Piña <i>Física de la materia</i>	Ultrafast geometrical rearrangement of solid neon upon photoexcitation of a NO impurity: A quantum dynamics study	Université Toulouse III- Paul Sabatier, Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité, <i>C. Meier</i>	09/07/12
R. Franklin Mergarejo <i>Física de la materia</i>	Photo-absorption et diffusion Raman dans des complexes de dihalogénés avec l'eau : Relation avec des expériences dans l'eau liquide, la glace et les clathrates	Université Toulouse III- Paul Sabatier, Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité, <i>N. Halberstadt</i>	09/07/12
R. R. Lozada García <i>Física</i>	Dynamics and photodynamics of acetylacetone in para-hydrogen matrices	Université Paris Sud, Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay, <i>C. Crépin-Gilbert</i>	12/12/12
E. L. Quintas Sánchez <i>Química-física</i>	Description théorique de la dynamique de recombinaison Eley-Rideal de l'azote moléculaire à la surface du tungstène	Université Bordeaux I, Institut des Sciences Moléculaires, <i>J.-C. Rayez, P. Larrégaray, C. Crespos</i>	12/12/12
A. Rivero Santamaría <i>Química-física</i>	Etudes théoriques classique et quantique de la collision réactive Si+OH	Université Lille 1, Laboratoire de Physique des Lasers, Atomes et Molécules, <i>M. Monnerville</i>	27/06/13
Y. O. Guerrero Martínez <i>Física</i>	Développements des champ de force à n -corps pour les propriétés des ions solvatés	Université Lille 1, Laboratoire de Physique des Lasers, Atomes et Molécules, <i>V. Vallet</i>	21/10/13
W. Arbelo González <i>Química-física</i>	Nouvelles perspectives dans les traitements classique et semiclassique de la dynamique réactionnelle	Université Bordeaux I, Institut des Sciences Moléculaires, <i>L. Bonnet</i>	15/11/13
O. Denis Alpizar <i>Química-física</i>	Quantum molecular collision studies for processes of astrophysical interest	Université Bordeaux I, Institut des Sciences Moléculaires, <i>T. Stoecklin</i>	01/04/14
M. Hernández Vera <i>Física</i>	Vers la compréhension de l'abondance des cyanures / isocyanures dans le milieu interstellaire	Université Le Havre, Laboratoire Ondes et Milieux Complexes, <i>F. Lique</i>	16/12/14
C. García Fernández <i>Física</i>	Modeling the optical answer of soot particles emitted in the Troposphere	Université de France-Comté, Institut UTINAM, <i>S. Picaud (en colaboración con J.-C. Rayez)</i>	26/11/15

La mayoría de los estudiantes involucrados en la experiencia son graduados de Licenciatura en Física Nuclear, mientras que sus doctorados fueron otorgados en las disciplinas de química-física (5), física (4) y física de la materia (2).

La adaptación de los estudiantes a nuevos conceptos y métodos ha sido excelente, lo que atesta el alto nivel de la formación académica recibida. Los estudios teóricos han incluido el desarrollo, implementación y prueba de

nuevas metodologías, así como la aplicación de métodos ya establecidos, sobre la base de experimentos numéricos. Las técnicas empleadas abarcan desde métodos estadísticos, clásicos, cuasi- y semi-clásicos, hasta cálculos cuánticos dependientes (paquetes de onda) e independientes del tiempo en estudios de dinámica inelástica y reaccional, así como cálculos *ab initio* de estructura electrónica. Desde el punto de vista experimental, se han desarrollado técnicas de espectroscopía infrarroja a bajas temperaturas.

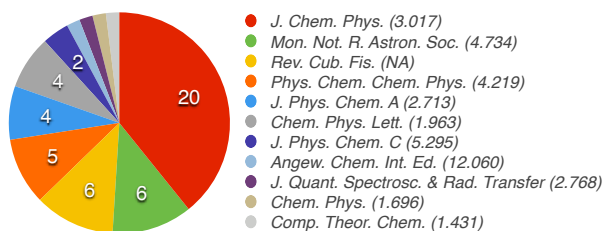
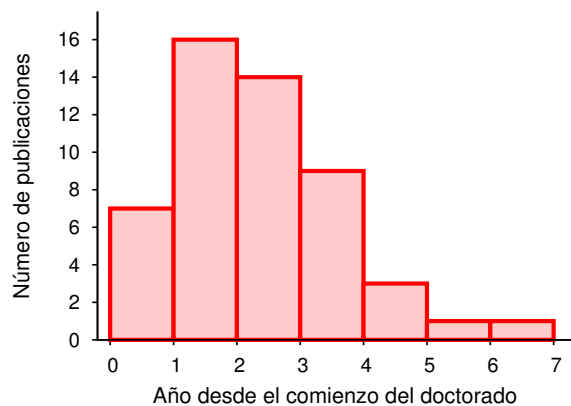


Figura 2. Estadística de publicaciones asociadas a las tesis en cotutela terminadas hasta la fecha, incluyendo distribución del número de publicaciones por año doctoral, número de publicaciones por revista e índice de impacto de 5 años (entre paréntesis, fuente: InCites™ Journal Citation Reports®).

Más allá del aspecto formativo, individualmente beneficioso en términos profesionales y personales, la colaboración ha sido particularmente rica y productiva. La Figura 2 muestra detalles sobre la estadística de publicaciones en la muestra de 11 tesis defendidas. La distribución, con un 60% de las publicaciones logradas entre el 2^{do} y 3^{er} año de tesis, y un 30% adicional entre el 1^{er} y 4^{to} años, resalta el éxito de la experiencia de co-tutela, que ha permitido la finalización de los doctorados entre 3 y 4 años conforme a los estándares franceses. Durante sus doctorados, los estudiantes realizaron entre 16 y 26 meses de estancia en laboratorios franceses—23.3 meses de media. Desde el punto de vista de la producción científica, la divulgación de los resultados de investigación ha sido amplia, con un promedio de 4.6 publicaciones por estudiante en revistas con comité de revisión (ver Figura 2), y más de 70 contribuciones en talleres, congresos y conferencias nacionales e internacionales—entre 6 y 7 participaciones por estudiante. Varios de estos resultados han recibido premios de diversa índole, desde premios a los carteles presentados en conferencias (MAMPC 2013, NSF), hasta 3 Premios Anuales de la Academia de Ciencias de Cuba (2009, 2012 y 2015).

La gran mayoría de los doctores formados a través de esta colaboración han continuado sus carreras académicas y realizado una o varias estancias post-doctorales en grupos de investigación en Francia, Reino Unido, Alemania, Suiza, España, Austria, Brasil y Argentina. Algunos han ocupado posiciones dentro del sistema académico cubano e iniciado la formación de sus propios grupos de investigación, como es el caso de la Dra. Llinersy Uranga Piña, vicedecana docente de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana y líder del grupo “Dinamo”, quien fue recientemente seleccionada por la Academia de Ciencias para el Tercer Mundo (TWAS) para participar en la reunión anual de los premios Nobel de Física en 2016.



Figura 3. Logotipo del Workshop on Atomic and Molecular Physics (izquierda) y fotografías de los participantes en las ediciones de 2009 (arriba) y 2015 (abajo).

Los doctorados fueron financiados principalmente mediante recursos propios de los grupos de investigación e instituciones francesas involucradas, el Servicio de Cooperación y Acción Cultural de la Embajada de Francia en Cuba, así como por 4 becas de excelencia Eiffel otorgadas por el Ministerio de Asuntos Extranjeros de Francia y otras becas de los consejos regionales franceses. La ausencia de acuerdos bilaterales y de financiamiento específico más allá del provisto por la Embajada de Francia en Cuba ha previsiblemente dificultado la colaboración desde el punto de vista financiero.

III. UNA CITA PERIÓDICA FRANCO-CUBANA: EL WAMP (WORKSHOP ON ATOMIC AND MOLECULAR PHYSICS)

Dada la amplitud creciente de la colaboración, se creó en 2009 un taller dedicado específicamente a potenciar oportunidades de intercambio e incitar la sinergia entre los estudiantes e investigadores del InSTEC, los estudiantes en cotutela y los profesores e investigadores de universidades francesas. Así nació el *Workshop on Atomic and Molecular Physics*. Este taller, que comenzó con la participación de una decena de estudiantes, dos universitarios franceses y dos profesores cubanos, devino periódico (ritmo trianual) y reunió más de 50 personas de 11 países diferentes en su tercera edición en 2015, entre los cuales 25 estudiantes e

investigadores cubanos (ver figura 3). Semejante crecimiento revela el marcado interés que suscita la colaboración académica con Cuba. Desde la celebración de su última edición, dos nuevos estudiantes cubanos han iniciado sus tesis doctorales en Francia (ISM, Bordeaux).

IV. PERSPECTIVAS

La experiencia de la cooperación franco-cubana en físico-química molecular en los 10 últimos años ha sido exitosa desde todos los puntos de vista. Se ha desarrollado una ciencia de alto nivel, al mismo tiempo que se han establecido profundas relaciones entre investigadores y estudiantes de ambos países. Su éxito resulta de la excelente formación académica de los estudiantes cubanos que han logrado desarrollar las líneas de investigación conjuntas. Esta cooperación, cuyas bases se crearon en ausencia de acuerdos bilaterales, solo precisa ahora ser desarrollada en toda su amplitud dentro de un contexto internacional mucho más favorable.

V. AGRADECIMIENTOS

Deseamos agradecer a Olivier Dulieu del Laboratoire Aimé Cotton, Orsay, Francia, por sugerirnos el tema de este artículo.

LA REVISTA CUBANA DE FÍSICA HA SIDO MONTADA EN EL *OPEN JOURNAL SYSTEM*

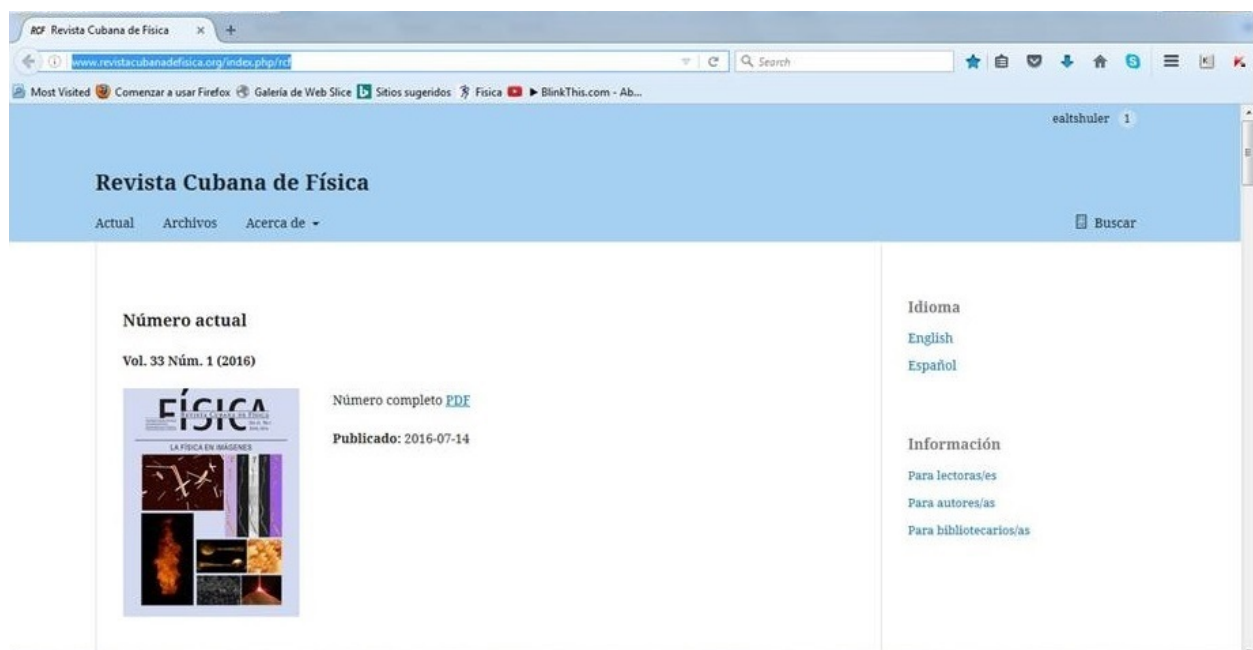
Desde la pasada última semana de Octubre (2016), la Revista Cubana de Física (RCF) tiene una nueva página web, después de X meses “offline”. En estos momentos ya están disponibles en el nuevo formato el más reciente número, Vol.33 No.1 (2016), y la información básica sobre la revista, para autores, el equipo editorial, y los datos de contacto. El resto de los archivos de la RCF (pre-2016) son accesibles en sus respectivos vínculos a la página web antigua de la RCF, y en un directorio FTP, pero todos serán incorporados paulatinamente a la página en el nuevo formato estándar de visualización de la web actual. Agradecemos la máxima divulgación de esta noticia.

La nueva página de la RCF ha sido montada en el Open Journal System (OJS), una plataforma intuitiva y “amigable” de fácil asimilación. Este sistema permite la automatización del funcionamiento editorial (envíos, respuestas, seguimiento) y de la gestión de la información (citas, imágenes, información complementaria). Así mismo, también posee herramientas para la divulgación más efectiva e inmediata de nuestra producción científica. Para nadie es un secreto que esos son “talones de

Aquiles” para nuestro casi imperceptible índice de impacto. En general aún falta mucho trabajo por hacer, pero la intención es de proveer a nuestra web de los estándares ya comunes en las webs de las revistas científicas de primer impacto a nivel mundial.

Sin embargo, el nuevo sistema OJS está pensado para optimizar el trabajo editorial sobre la base de la auto-gestión de la información por parte de los autores. Consecuentemente nos encontramos ante una problemática, pues a lo largo de los 35 años de la RCF se han generado más de un millar de artículos. Si consideramos entre 10 y 15 minutos el tiempo medio solo para subir una publicación pre-2016 a la nueva web, necesitaríamos más de 300 horas de trabajo para actualizar la página de la RCF. Tales condiciones implican un gran reto para el reducido y altruista equipo de edición electrónica de la RCF. Básicamente tardaremos meses antes de que la actualización sea total.

De esta manera, con el objetivo de agilizar y perfeccionar la actualización de la nueva página web de la RCF, convocamos a todos los autores y colaboradores voluntarios a participar en el nuevo “proceso expansivo”.



Página web de la Revista Cubana de Física, visitada el 11 de noviembre de 2016.

Específicamente a los autores les pedimos:

1. Registrarse con una cuenta de usuario. Aquí es importante dejar su nombre, e-mail, afiliación (en Español e Inglés) y el código ORCID. Sobre las afiliaciones múltiples sugerimos separarlas con el signo “&”.
2. Revisar el registro de sus artículos (del autor) en la RCF y:

- a Si ya están disponibles en el nuevo formato, verificar la correcta divulgación de la información pertinente. Cualquier errata, favor de comunicarla vía e-mail a rcf1@revistacubanadefisica.org. Aquí es de suma importancia que las informaciones de contacto se actualicen. Algunos autores a lo largo de los años han cambiado su e-mail, afiliaciones, etc., pero la web

pretende brindar la información más veraz.

- b** Si aún no están disponibles en el nuevo formato, será bienvenidas sus "prácticas de envío". De esa manera podrá usted familiarizarse con el OJS y sus publicaciones serán "más visibles más rápidamente". Para realizar esta tarea deberá seguir todos los pasos que orienta la web (como si fuera un "Nuevo envío") pero en el espacio de "Comentarios para el Editor/a" por favor especifique que se trata de un artículo ya publicado y precise datos (Año, Volumen, Número y Páginas). También puede enviar las mismas acotaciones vía e-mail a rcf1@revistacubanadefisica.org, pero en cualquier caso también tenga en cuenta que:
- Si va a hacer copy/paste del *.pdf, las palabras con tildes, diéresis o signos pueden dar errores, a veces no apreciables a simple vista. Esto es crítico, por ejemplo, en los resúmenes y títulos en español. Sugerimos primero copiar en un editor de texto básico (e.g. Bloc de Notas) y verificar posibles cambios.
 - Si no conoce el e-mail de alguno de sus coautores recomendamos inventarse uno como "ninguno@mail.com". Aspiramos a que en un futuro todos nuestros autores actualicen su e-mail.
 - No necesita cargar el *.pdf de su contribución (cuando ya está publicada). En el paso en que la web solicita los archivos de su contribución puede subir un archivo sin contenido, preferiblemente con la información de identificación en el título (e.g. Vol-XX_Núm-YY_Pág-ZZ.txt de 0kB). Esto es muy

útil para conexiones lentas y/o con limitaciones de internet. Solo tenga en cuenta que en este caso serán imprescindibles la nota a los Editores/as (Año, Vol, Núm & Págs) y/o la especificación en el archivo sin contenido: solo con el título y los autores no podemos encontrar su pdf (menos que revisemos uno por uno los mil y tantos).

- Se aceptan sugerencias directas (con el consiguiente envío del archivo *.jpg) de la imagen portada (cover image, en Inglés) de su artículo. Este concepto es ampliamente utilizado en las revistas de impacto para llamar la atención visualmente sobre el contenido del artículo. Usted puede reenviar una imagen de las que ya aparecen en el artículo que considere representativa de su trabajo, o también puede modificarla o elaborar una nueva que comunique mejor el mensaje.

A los voluntarios en contribuir con la RCF también los alentamos a registrarse como usuarios y ponerse en contacto con los web masters vía e-mail a rcf1@revistacubanadefisica.org. Les asignaremos una publicación pre-2016 para que envíen y luego, si les parece bien, la cantidad que deseen.

Confiamos en que todas las experiencias serán enriquecedoras y agradecemos por adelantado toda la ayuda que de seguro recibiremos en los próximos meses.

O. Almora

*Miembro del equipo de edición electrónica
Revista Cubana de Física*

UNA OLIMPIADA CON ONDA... GRAVITACIONAL



Delegación cubana a la XXI Olimpiada Ibero-americana de Física. De izquierda a derecha: Alfredo Carreras, Daniel Milanés, profesor Rafael E. Rodríguez-Pino, Carlos Lopetegui y Darvis Girbau.

La vigésimo primera olimpiada Iberoamericana de Física de 2016 se celebró en Carmeno, Uruguay, del 26 de septiembre al 1ro de octubre de 2016. Los temarios destacaron por su actualidad científica y elegancia. Vale destacar un ejercicio teórico sobre la detección de ondas gravitacionales, y otro (¡increíblemente también teórico!) que analiza el funcionamiento de los acelerómetros miniatura que poseen los "smartphones" y su uso como instrumento de medición en experimentos concretos.

Cuba se presentó con una delegación compuesta por un profesor y 4 estudiantes, todos los cuales obtuvieron medallas. Carlos Lopetegui (Pinar del Río) y Daniel Milanés Chau (Camagüey) se llevaron dos medallas de oro, mientras que Arvis Girbau (Las Tunas) y Alfredo Carreras (Villa Clara) se llevaban sendos bronces.

Prof. R. E. Rodríguez-Pino
IPVCE "Máximo Gómez", Camagüey
y E. Altshuler

POR EL USO PACÍFICO DEL ESPACIO

El XIII Taller El Espacio Ultraterrestre y su Uso Pacífico, organizado por el Instituto de Geofísica y Astronomía (IGA) y el planetario “Rosa Elena Simeón” de la Oficina del Historiador de La Habana, fue celebrado los días 3, 4 y 5 de octubre del año en curso, en el propio Planetario.

La inauguración y palabras de bienvenida, quedaron a cargo de la directora del IGA, Ing. Martha Rodríguez Uratsuka.

Se presentaron 15 trabajos de 14 autores. Los temas principales tratados fueron Astronomía, Geomagnetismo, Ionosfera, Aplicación de imágenes satelitales a la cartografía, la geología y a la exploración petrolera, y Derecho espacial

Se impartieron dos Conferencias Magistrales: “*El sensoramiento remoto en la cartografía de los escenarios de peligros geológicos por desarrollo del carso en la capital cubana*”, por el Dr. Efrén Jaimez Salgado, del IGA y “*Proyecto CubaSat-1*”, por el MsC. Juan Carlos Valdés Abreu, del ISPJAE.

Participaron especialistas del Instituto de Geofísica y Astronomía (AMA, CITMA), del Planetario Rosa Elena Simeón (Oficina del historiador de La Habana), del Centro de Investigación y Desarrollo (CIDT, MININT), del Instituto Superior Politécnico José A. Echevarría (ISPJAE), del Centro de Investigaciones del Petróleo (MINEM), de la Unión Nacional de Ingenieros y Arquitectos de Cuba (UNAIACC), de los Laboratorios MEDSOL, y de la Empresa de Seguros de Cuba.



Foto de grupo del XIII Taller El espacio ultraterrestre y su Uso Pacífico, tomada en el planetario de La Habana (3, 4 y 5 de octubre de 2016).

En esta ocasión, las palabras de clausura del taller, estuvieron a cargo de la Dra. Maritza García García, Presidenta de la Agencia de Medioambiente (AMA).

Ing. Martha Rodríguez Uratsuka
Directora, IGA

EN BUSCA DEL CEREBRO PERFECTO

El 7 de julio de 2016, Pedro Antonio Valdés Sosa defendió brillantemente la tesis de doctorado “Modelos aproximados para la reconstrucción de fuentes del EEG”, tutelada por el doctor Pedro Valdés. La defensa ante el Tribunal Nacional de Ciencias Físicas tuvo lugar en el teatro principal del INSTEC, y fungieron como

oponentes los doctores Alejandro Cabo y José Luis Hernández Cáceres.

E. Altshuler

10 AÑOS APRENDIENDO CRISTALOGRAFÍA

La serie de escuelas “International School on Fundamental Crystallography” comenzó hace diez años en la Facultad de Física y este año, marcando su décimo aniversario regresó a su lugar de origen. Las escuelas, con una frecuencia bianual, son auspiciadas por la Unión Internacional de Cristalografía, han sido importantes en la formación de posgrado para estudiantes de Latinoamérica.

En esta ocasión la actividad tuvo lugar entre el 30 de octubre y el 5 de noviembre de 2016, y participaron alrededor de treinta estudiantes, dentro de los cuales una docena provenía de Uruguay, Brasil, México, Costa Rica, Colombia, Ecuador y Puerto Rico. Como parte del claustro, nos visitó el Prof. Moisés Aroyo, quien preside la Comisión de Cristalografía Matemática y Teórica de la IUCr, y es el editor en jefe del tomo A de las Tablas Internacionales

de Cristalografía. También nos acompañaron sendos profesores de Brasil, Uruguay y México.

Los temas tratados incluyeron introducción a la cristalografía y conceptos básicos, cristalografía en el espacio directo y recíproco, así como sesiones prácticas “cristalografía online”, haciendo uso del servidor de cristalografía de la Universidad de Bilbao.

El último día se realizó un taller sobre nanocristalografía. La próxima edición de esta escuela está prevista para el 2018 en Colombia.

Dr. E. Estevez
*Facultad de Física,
Universidad de La Habana*



Una sesión de CubaFotovoltaica'2016. El profesor Daniel Stolik se dirige a los participantes.

El Taller CUBAFOTOVOLTAICA se gestó y realizó por primera vez en la Universidad de la Habana, en el 2011, con el objetivo de crear consenso para el desarrollo de un programa integral para Cuba en este tema. Liderado por el Dr. Daniel Stolik, durante los 4 años siguientes el taller fue exclusivamente nacional para finalmente extenderse a la comunidad internacional en el 2015. En este período y hasta la fecha, el CUBAFOTOVOLTAICA ha trabajado en busca de un programa fotovoltaico nacional, dando respuesta a la necesidad de abrir un espacio de intercambio entre el sector fotovoltaico industrial y científico, del que los dirigentes de las políticas de desarrollo de energías renovables en Cuba pudieran beneficiarse.

La sexta edición del CUBAFOTOVOLTAICA ha sido igualmente organizada por el Laboratorio Integral Fotovoltaico del IMRE y se celebra del 21 al 25 de Noviembre del 2016, en el Palacio de las Convenciones, dentro de la 18 Convención Científica de Ingeniería y Arquitectura – CCIA. Los organizadores principales han sido el Dr. Daniel Stolik y el Dr. Julio César Rimada Herrera. En esta ocasión se ejecuta un amplio programa en el que se analizan temas variados que van desde la presentación del estado del arte de la fotovoltaica mundial y en Cuba; las nuevas tecnologías bifaciales de celdas solares de silicio; las mejores prácticas en instalaciones fotovoltaicas; la operación y mantenimiento de sistemas fotovoltaicos; el desarrollo prospectivo de la penetración e integración fotovoltaica en Cuba; e incluyendo otros como la necesidad de la capacitación y verificación de la calidad integral de los sistemas fotovoltaicos. El taller ha tenido una gran participación con 8 ponencias centrales y la realización de sesiones de debates en temas de actualidad que requieren una amplia discusión. Entre los más de 100 asistentes se encuentran ampliamente representado tanto el sector industrial como el académico, así como varias provincias del país. Entre los invitados extranjeros se destaca la presencia de representantes de instituciones como el Fraunhofer Institute in Solar Energy (ISE, Freiburg) y el International Solar Energy Research Center Konstanz, ambos de Alemania.

L. Vaillant-Roca
IMRE, Universidad de la Habana

