

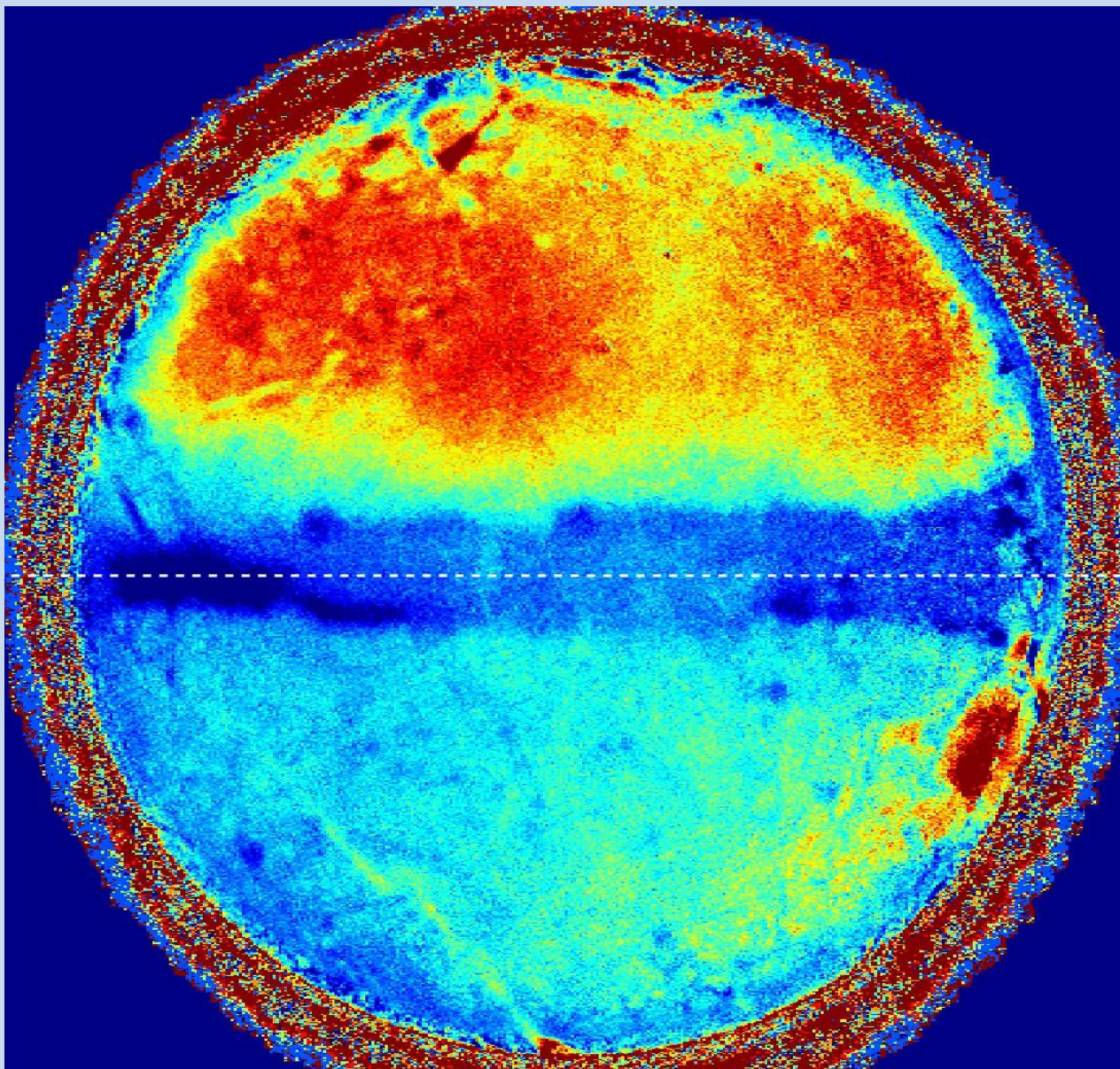
FÍSICA

REVISTA CUBANA DE FÍSICA

FÍSICA

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

Vol.41 No.2
DIC, 2024



**UN ENCUENTRO TEMPESTUOSO
ENTRE LA FÍSICA Y LA BIOLOGÍA**

Portada: Visualizing oxygen consumption in one of the experiments performed during the ICTP's "Hands-on Quantitative Biology School" celebrated in Havana, November 4-15, 2024 –Hurricane "Rafael included". For more details, see our News section.

EDITOR

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

EDITOR EJECUTIVO

E. RAMÍREZ-MIQUET
ermiquet@gmx.com

EDICIÓN ELECTRÓNICA

A. C. IGLESIAS-JAIME,
University of Lorraine, France
iglesias692@gmail.com

L. MARTÍNEZ

Facultad de Física, Universidad de La Habana,
lazarofk2000@gmail.com

EDITORES ASOCIADOS

O. ALMORA
Universitat Rovira i Virgili
osbel.almora@urv.es

A. J. BATISTA-LEYVA

Instec, La Habana
abatista@instec.cu

W. BIETENHOLTZ

UNAM, México
wolbi@nucleares.unam.mx

J. O. FOSSUM

NTNU, Noruega
Jon.fossu@ntnu.no

J. –P. GALAUP

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

L. H. GREENE

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

J. LLOVERA

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

O. de MELO

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

O. MULET

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

P. MUNÉ

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

T. POESCHEL

University Erlangen-Nuremberg
thorsten.poeschel@fau.de

G. ROJAS-LORENZO

Instec, La Habana
german@instec.cu

T. SHINBROT

Rutgers University
shinbrot@soemail.rutgers.edu

C. A. ZEN-VASCONCELOS

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

TODOS LOS ARTÍCULOS EN FORMATO-e:

www.revistacubanadefisica.org

COORDENADAS

87 NUEVOS TIEMPOS. SIEMPRE DIFÍCILES.

[NEW TIMES. ALWAYS HARD]

R. MULET

ARTÍCULOS ORIGINALES

88 PHOTODISSOCIATION OF THE COLLINEAR VAN DEL WAALS COMPLEX NeBr_2 (B, $v=14,34$)

[DINÁMICA DE FOTODISOCIACIÓN DEL COMPLEJO COLINEAL DE VAN DER WAALS NeBr_2 (B, $v=14,34$)]

C. A. PIÑEIRO-MORENO, L. URANGE-PIÑA, A. MARTÍNEZ-MESA

93 THE TWO-STATE DIFFUSION PROBLEM WITH RESETTING

[REAJUSTE ESTOCÁSTICO PARA LA DIFUSIÓN EN DOS ESTADOS]

J. J. PÉREZ-DÍAZ, R. MULET

99 ON THE VARIABLE MASS PROJECTILE MOTION

[SOBRE EL PROBLEMA DEL MOVIMIENTO DE UN PROYECTIL DE MASA

VARIABLE] V. IVCHENKO

103 DFT STUDY OF BaKN_3 AND BaRbN_3 PEROVSKITES: REVEALING THEIR MECHANICAL, OPTOELECTRONIC, AND MAGNETIC PROPERTIES

[ESTUDIO DFT DE PEROVSKITAS BaKN_3 Y BaRbN_3 : REVELANDO SUS PROPIEDADES MECÁNICAS, OPTOELECTRÓNICAS Y MAGNÉTICAS]

S. BENATMANE, S. HEZIL-ZIANE

113 FABRICATION, CHARACTERIZATION AND PERFORMANCE OF GRAPHENE OXIDE-BASED FILTRATION DEVICES

[FABRICACIÓN, CARACTERIZACIÓN Y COMPORTAMIENTO DE DISPOSITIVOS DE FILTRACIÓN BASADOS EN GRAFENO]

A. A. OLIVEIRA, J. A. G. CARRIÓ

120 A FINITE ELEMENT METHOD EXPLORATION OF TECHNOLOGICALLY RELEVANT GEOMETRIES IN PIEZOELECTRIC ENERGY-HARVESTING PZT-4

[EXPLORACIÓN POR ELEMENTOS FINITOS DE GEOMETRÍAS TECNOLÓGICAMENTE RELEVANTES PARA LA RECOLECCIÓN DE ENERGÍA PIEZOELÉCTRICA EN PZT-4]

H. MARTÍNEZ-DÍAZ, A. PELÁIZ-BARRANCO, TONGQING YANG

124 ESTUDIO DE LA DINÁMICA DE ROTACIÓN DE UN CUERPO RÍGIDO A TRAVÉS DEL SENSOR ACCELERÓMETRO DE UN DISPOSITIVO MÓVIL

[STUDY OF THE ROTATION DYNAMICS OF A RIGID BODY THROUGH A MOBILE DEVICE ACCELEROMETER]

J. RODRÍGUEZ, C. GARCÍA, E. GOVEA

128 CONSTRUCCIÓN Y AUTOMATIZACIÓN DE UN SISTEMA DE CRECIMIENTO DE CAPAS DELGADAS FERROELÉCTRICAS

[CONSTRUCTION AND AUTOMATION OF A GROWTH SYSTEM FOR FERROELECTRIC THIN FILMS]

A. J. ADAY-CANTERO, Y. PÉREZ-MARTÍN, Y. GONZÁLEZ-ABREU, A. PELÁIZ-BARRANCO

PARA FÍSICOS Y NO FÍSICOS

134 THE PHYSICS NOBEL 2024: THE FOUNDATIONS OF ARTIFICIAL INTELLIGENCE

[EL NOBEL DE FÍSICA 2024: LOS FUNDAMENTOS DE LA INTELIGENCIA ARTIFICIAL]

R. MULET, C. DÍAZ-FALOH

MOMENTOS DE LA FÍSICA EN CUBA

137 HISTORICAL AND RECENT OBSERVATIONS OF COMETS IN CUBA

[OBSERVACIONES HISTÓRICAS Y RECIENTES DE COMETAS EN CUBA]

Y. CEBALLOS-IZQUIERDO, N. A. GALLARDO-QUESADA, L. E. RAMOS-GUADALUPE

144 INSTRUIR TALENTOS EN LA FÍSICA: UN RETO

[INSTRUCTING TALENTED STUDENTS IN PHYSICS: A CHALLENGE]

L. D. FERNÁNDEZ-QUINTANA, F. R. MARTÍNEZ-SÁNCHEZ

146 NUESTRA FÍSICA EN NOTICIAS

OBITUARIOS

150 ARMANDO PÉREZ PERDOMO (20 DE SEPTIEMBRE DE 1940- 21 DE SEPTIEMBRE DE 2024)

C. RODRÍGUEZ-CASTELLANOS

152 FERNANDO GUZMÁN (30 MAYO 1951- 16 OCTUBRE 2024)

E. PEDRERO-GONZÁLEZ, O. DÍAZ-RIZO

153 MAYRA PAULINA HERNÁNDEZ SÁNCHEZ (6 DE JUNIO DE 1954- 15 DE AGOSTO 2024)

J.A. MARTÍNEZ, G. NAVARRO-MARÍN, R. BARZAGA

155 JOSÉ MANUEL MORA-HERNÁNDEZ (23 SEPTIEMBRE 1964- 30 DE SEPTIEMBRE DE 2024)

S. LARRAMENDI

156 ÁNGEL FERRAT-ZALDO (1630 JULIO 1948- 1 ENERO 2024)

G. M. VEGA-CRUZ

NUEVOS TIEMPOS. SIEMPRE DIFÍCILES.

NEW TIMES. ALWAYS HARD.

R. MULET^{a†}

Centro de Sistemas Complejos y Departamento de Física Teórica. Facultad de Física, Universidad de La Habana, Cuba. roberto.mulet@gmail.com[†]

El 11 de abril del 2024 se eligió una nueva junta directiva de la Sociedad Cubana de Física (SCF) la cual, desde entonces, presido. No habían pasado dos días y el editor jefe de esta revista me solicitaba que escribiera un editorial con mis impresiones respecto al futuro trabajo de la SCF. Trato de cumplir aquí con ese compromiso.

Primero que nada, debo decir que ha sido un honor ser elegido para este cargo, y lo asumo como una enorme responsabilidad. Este es un sentimiento que estoy seguro comparto con todos los compañeros de la actual junta, incluidos aquellos que llevan varios años en la misma.

El trabajo que nos espera es difícil. Primero, defender los resultados que había alcanzado la junta anterior. En particular, la estabilidad de esta revista, la presencia de nuestros jóvenes en el C^2AM y la membresía de la sociedad en varias instituciones internacionales. Este trabajo de relaciones internacionales debe mantenerse y ampliarse. También fue muy importante en el trienio anterior el trabajo de la sección de mujeres. No hay que tener un gran control de la aritmética para entender que si en nuestra sociedad hubieran tantas mujeres haciendo física como hombres, hoy tendríamos prácticamente el doble de los miembros.

Después, considero fundamental elevar el nivel de actividad de nuestras secciones. Debemos trabajar para que todas

se reúnan al menos una o dos veces antes del próximo Congreso. Estoy seguro de que esos intercambios impactarán en la percepción que tenemos de la ciencia que hacemos, en el establecimiento de nuevas colaboraciones, y también en conseguir una actualización continua de la membresía. Esta última, es una asignatura que se resuelve aparentemente una vez cada tres años, pero nunca logra la estabilidad que quisiéramos. En un contexto similar, es importante recuperar las conexiones con las provincias, especialmente en el centro y el oriente de Cuba.

Nos toca también mejorar la comunicación de la SCF, no solo divulgando en diversos medios sobre Física, sino poniendo énfasis en la Física que hacemos en Cuba y en los problemas que tiene la SCF.

Sin embargo, el problema más difícil al que debemos enfrentarnos es el de la situación de la enseñanza de la Física en los niveles medio y medio-superior. Es verdad que muchos de los problemas en esta enseñanza no son exclusivos de la Física, pero este es un tema que sale a colación congreso tras congreso y que debemos atender.

Si queremos mantener como país la pretención quijotesca de ser independientes, no puede bastar con hacer mejor ciencia o tener buenos estudiantes en nuestras carreras de Física. Necesitamos también que el pueblo sepa Física.

PHOTODISSOCIATION DYNAMICS OF THE COLLINEAR VAN DER WAALS COMPLEX $\text{NeBr}_2(\text{B}, \nu=14-34)$

DINÁMICA DE FOTODISOCIACIÓN DEL COMPLEJO COLINEAL DE VAN DER WAALS $\text{NeBr}_2(\text{B}, \nu=14-34)$

CARLOS ANDRÉS PIÑEIRO-MORENO^a, LLINERSY URANGA-PIÑA^{b,c} AND ALIEZER MARTÍNEZ-MESA^{ct}

a) Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas, Universidad de La Habana, Ave. Salvador Allende y Luaces, Quinta de Los Molinos, Plaza, La Habana 10600. Cuba.

b) Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité (FeRM), Université Paul Sabatier, UMR 5589, F-31062 Toulouse Cedex 09, France.

c) DynAMoS (Dynamical processes in Atomic and Molecular Systems), Facultad de Física, Universidad de la Habana, La Habana, Cuba. aliezer@fisica.uh.cu[†]

[†] corresponding author

Recibido 1/8/2024; Aceptado 26/9/2024

We perform trajectory-based simulations of the dissociative dynamics of the collinear van der Waals complex $\text{NeBr}_2(\text{B}, \nu)$ following photoexcitation to the B electronic state and for varying vibrational excitations of the dihalogen molecule in the range $\nu=14-34$. The quantum dynamics of unimolecular decay is mapped onto a classical-like dynamics in an extended phase space. This methodology allows us to compute the time-dependent dissociation probability, intramolecular energy transfer mechanisms, and transient vibrational state distributions of the linear triatomic system, which are challenging to access experimentally using modern pump-probe spectroscopy techniques. The computed quantities can be used to refine interaction potential models at collinear geometries, which are less well characterized than the T-shaped isomer.

Empleamos simulaciones basadas en trayectorias para estudiar la disociación del complejo colineal de van der Waals $\text{NeBr}_2(\text{B}, \nu)$, tras la fotoexcitación al estado electrónico B y para distintos niveles vibracionales de la molécula de dihalógeno en el rango $\nu=14-34$. La dinámica cuántica de la reacción unimolecular se describe mediante la evolución temporal de las trayectorias en un espacio de fases ampliado. Esta metodología permite simular propiedades que resultan difíciles de determinar experimentalmente utilizando técnicas modernas de espectroscopía de bombeo-sonda, como la evolución temporal de la probabilidad de disociación y de la distribución de estados vibracionales, así como los mecanismos de redistribución intramolecular de la energía. Los observables calculados pueden utilizarse para refinar los modelos de potencial de interacción para el isómero lineal, que se conoce con menos precisión que para la configuración en forma de T.

PACS: Quantum molecular dynamics (dinámica molecular cuántica), Quantum trajectory method (método de trayectorias cuánticas), Computational physics (física computacional), Molecular physics (física molecular)

I. INTRODUCTION

In recent decades, continuous advances in ultrafast laser spectroscopy have made it possible to investigate dynamical phenomena in atomic and molecular systems across a wide range of time scales [1]. By employing ultrashort laser pulses and delays for improved time resolution, researchers have been able to study phenomena such as chemical reactions and other molecular reorganization processes (occurring typically on the picosecond timescale), molecular vibrations (femtoseconds), and, more recently, electronic phenomena (on the attosecond timescale).

Owing to the complexity of transient absorption spectroscopy signals, elaborate computer simulations are often required to unravel the underlying atomic motion. Nowadays, highly accurate numerical simulations are computationally feasible for physico-chemical phenomena where nuclear motion can be treated classically. Nevertheless, the computational cost of rigorous quantum dynamics simulations (e.g., based on wave function representations using large spatial grids or basis sets) increases exponentially with system size, limiting their applicability to molecular systems with only a few degrees of

freedom [2].

Consequently, the development and benchmarking of novel computational methods for quantum molecular dynamics has become a topic of increasing interest. In this context, trajectory-based approaches are particularly attractive due to more favourable scalability compared to quantum wave packet propagation techniques. Additionally, the use of familiar concepts from classical mechanics facilitates intuitive interpretation of the results.

In addition to approximate methodologies, such as semiclassical and hybrid quantum-classical propagation schemes [3], exact reformulations of quantum mechanics in terms of trajectories have been proposed. The coupled harmonic oscillators representation introduced in Ref. [4], and the quantum trajectory method [5], are prominent examples of the latter approach. In Ref. [6], for example, these two methodologies have been combined to study the vibrational predissociation dynamics of the triatomic van der Waals complex ArBr_2 .

Van der Waals aggregates are widely used as model systems to study energy redistribution mechanisms and the

role of intermolecular interactions. Among these, triatomic dihalogen-rare gas complexes such as RgBr_2 , RgI_2 , RgICl_2 ($\text{Rg} = \text{He, Ne, Ar}$) have been extensively investigated experimentally and theoretically [7]. Linear and T-shaped isomers of rare gas-halogen complexes exhibit similar stability in the ground electronic state. However, most studies have focused on the T-shaped isomers due to their more intense experimental signals and longer lifetimes compared to the corresponding linear isomers, facilitating detection of the former [8]. Hence, a wealth of information is available on the vibrational and electronic predissociation mechanisms starting from T-shaped structures, while information on the linear isomers remains scarce.

The aim of this paper is to investigate the dissociation dynamics of the linear isomer of the van der Waals complex $\text{NeBr}_2(\text{B}, \nu)$ following photoexcitation to the B electronic state of the dihalogen. To this purpose, we considered initial vibrational excitations in the range $\nu=14\text{-}34$, spanning the range of Br_2 vibrational levels which are experimentally accessible using modern ultrafast laser spectroscopy techniques. The present methodology has been extensively benchmarked in stringent test systems (see [6], and references therein). The present simulations provide insight into the lifetimes and the dissociation pathway of the collinear $\text{NeBr}_2(\text{B}, \nu)$ complex, which is difficult to obtain experimentally due to the aforementioned unfavourable spectroscopic signal intensity (compared to that of the T-shape isomer).

The paper is organized as follows. In section Methodology, we describe the main aspects of the 2-fold mapping of the ultrafast quantum dynamics, and the numerical details of the implementation. In section Results, we present and discuss the results concerning the dissociation probability and time scale, as a function of the initial vibrational excitation. The main findings are summarized in section Conclusions.

II. METHODOLOGY

We use Jacobi coordinates (r, R) to specify the configuration of the collinear NeBr_2 complex, where r is the Br-Br distance, and R is the separation of the Ne atom from the centre of mass of the Br_2 molecule.

Following Refs. [6, 9], the photoinduced dynamics of the van der Waals complex is described in an effective phase space $\{q_1, \dots, q_L, p_1, \dots, p_L, R_1, \dots, R_N, P_1, \dots, P_N\}$, and it is governed by the Hamiltonian:

$$\mathcal{H} = \sum_{nm} \left[\left(\hat{H}_{\text{Br}_2} \right)_{nm} + \frac{1}{N} \sum_i W_{nm}(R_i) \right] (q_n q_m + p_n p_m) + \frac{1}{N} \left[\sum_i \frac{P_i^2}{2\mu} + Q(R_1, \dots, R_N) \right]. \quad (1)$$

Hereafter, $\{q_n, p_n\}$, $n \in [1, L]$ are the generalized coordinates and conjugate momenta of a set of oscillators associated to each of the $L = 40$ lowest lying vibrational states of the dihalogen molecule. R_i denotes the position of the i -th element

of a set of $N = 200$ quantum trajectories spanning the region occupied by the probability density distribution along de van der Waals mode, and P_i is the corresponding conjugate momentum. The quantum potential Q and its first derivative, the quantum force, are computed within the Interacting Trajectory Representation (ITR) [10].

In equation (1), $(H_{\text{Br}_2})_{nm}$ and $W_{nm}(\hat{R})$ are the matrix elements of the Hamiltonian of the isolated Br_2 molecule, and of the van der Waals interaction $W(r, R)$ between the Br_2 molecule and the Ne atom, respectively. The Br_2 -Ne interaction potential in the ground electronic state is described through Morse-van der Waals functions fitting ab initio data for the triatomic complex, whereas in the B electronic state it is modelled as a superposition of Morse functions representing pairwise Br-Ne interactions [11]. Likewise, the Br-Br interaction in the B electronic state is modelled as a Morse potential:

$$V_{\text{Br-Br}}(r) = D \left[e^{-2\alpha(r-r_e)} - 2 e^{-\alpha(r-r_e)} \right], \quad (2)$$

with parameters $D = 3788 \text{ cm}^{-1}$, $\alpha = 2.045 \text{ \AA}^{-1}$, $r_e = 2.667 \text{ \AA}$.

The Hamiltonian \mathcal{H} is used to derive the canonical equations of motion in the $2(L + N)$ -dimensional phase space, which are solved numerically using the fourth order Adams-Moulton predictor-corrector method with an adaptive time step and relative error tolerance of 10^{-10} , started with the fourth order Runge-Kutta algorithm.

The initial conditions for the propagation are set as follows:

$$q_n(0) = \sqrt{2} \delta_{n\nu}, \quad p_n(0) = 0, \quad n = \overline{0, L-1} \\ R_{i+1} = R_i + \frac{1}{N \rho_0(R_i)}, \quad i = \overline{1, N} \quad (3)$$

This selection corresponds to the initial excitation of the vibrational level ν of the Br_2 molecule, while the initial positions of the quantum trajectories reproduce the probability density distribution $\rho_0(R)$ of the ground vibrational state along the van der Waals mode. The ground state density $\rho_0(R)$ is obtained from the solution of the time-independent Schrödinger equation in the ground electronic state, using a Householder reduction algorithm with implicit shifts [12]. The initial momenta P_i of the quantum trajectories are set to zero.

The time evolution of the phase space point is formally equivalent to the solution of the time-dependent Schrödinger equation within the time-dependent Hartree approximation [9].

The time-dependent occupation probability of the vibrational level n is

$$|c_n(t)|^2 = \frac{1}{2} (q_n^2 + p_n^2). \quad (4)$$

For each initial vibrational level ν , the $|c_n(t)|^2$ curve is fitted to a decaying exponential function in order to extract the lifetime τ of the initial state. In addition to the characteristic time scale $\tau(\nu)$, the vibrational population dynamics provides information on the vibrational relaxation pathways following photoexcitation.

At each point in time, the dissociation probability is computed by integrating the distribution of trajectories beyond a predefined distance $R_{max} = 10 \text{ \AA}$ in the asymptotic region where the potential vanishes. Within the ITR, this integral is equivalent to summing over all trajectories with positions $R_i(t) > R_{max}$.

$$P_d^{(\nu)}(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N H(R_i(t) - R_{max}), \quad (5)$$

where $H(x)$ is the Heaviside step function.

III. RESULTS AND DISCUSSION

III.1. Vibrational energy redistribution

In figure 1, we show the decay time τ of the initial vibrational state of the dihalogen in the collinear $\text{NeBr}_2(\text{B}, \nu)$ complex, as a function of the initial vibrational quantum number ν . It can be seen, that the decay of the initially photoexcited vibrational state occurs three orders of magnitude faster for the linear isomer, compared to the typical lifetimes of the same vibrational states in T-shaped NeBr_2 complex undergoing vibrational predissociation. Indeed, the experimental measurement of the predissociation lifetimes of T-shaped complexes yielded values between 84 ps and 15 ps, for increasing initial vibrational quantum numbers from $\nu = 16$ up to $\nu = 29$ [13]. Such disparity indicates that the relaxation mechanism of collinear NeBr_2 complexes is that of direct dissociation rather than vibrational predissociation.

Moreover, the decay of the initial vibrational state takes place progressively faster for increasing vibrational excitation.

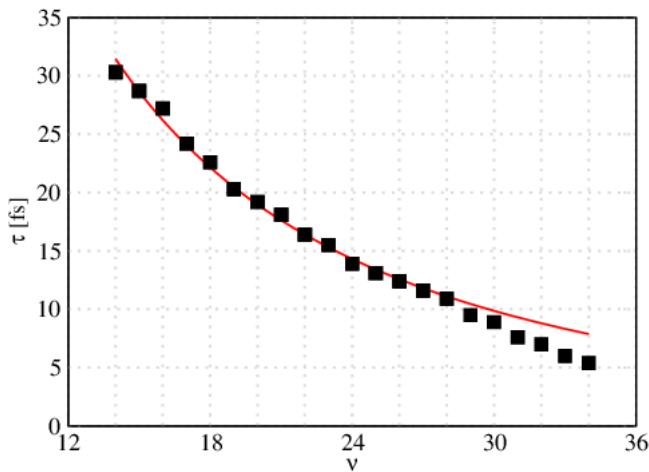


Figure 1. Decay time $\tau(\nu)$ of the initially photoexcited vibrational state ν of the collinear $\text{NeBr}_2(\text{B})$ complex (squares). The red curve represents the best fit of the data in the range $\nu = 14-28$ to the functional form $\tau(\nu) \sim \exp(-\kappa\nu)/\nu$.

Inserting the expansion of the van der Waals interaction potential around the equilibrium bond distance r_e of the dihalogen molecule,

$$W(r, R) \approx W(r_e, R) + \left(\frac{\partial W}{\partial r} \right)_{r_e} (r - r_e), \quad (6)$$

into Fermi's Golden Rule, we obtain the following expression for the energy width Γ_ν of the vibrational level ν :

$$\Gamma_\nu \approx \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\nu'} [\Theta_W(\nu)]^2 |\langle \nu' | (r - r_e) | \nu \rangle|^2. \quad (7)$$

Here, the symbol $\Theta_W(\nu)$ stands for the integral over R of the product of three functions, namely the initial and final wavefunctions along the van der Waals mode, and $\left(\frac{\partial W}{\partial r} \right)_{r_e}$. The sum in expression (7) is dominated by the dipole matrix elements coupling the initial state to the nearest neighbouring vibrational levels $\nu + 1$ and $\nu - 1$.

For low enough vibrational levels $\nu \ll \sqrt{2m_{Br}D}/(\hbar\alpha) = 65.5$, the ν -dependent quantities in equation (7) behave as $\Theta_W(\nu) \approx \exp(-\kappa\nu)$, and $\langle \nu \pm 1 | (r - r_e) | \nu \rangle \approx \nu$ [14]. Actually, it can be seen that the data closely follow the anticipated curve $\tau(\nu) \sim \Gamma_\nu^{-1} \sim \exp(-\kappa\nu)/\nu$ for vibrational quantum numbers up to $\nu = 28$, and deviates from this functional form for $\nu \geq 29$.

Furthermore, the coupling of the initial vibrational state ν to the level $\nu + 1$ is slightly larger than the coupling to the level $\nu - 1$, due to the progressive reduction of the energy level spacing of a Morse oscillator for increasing ν . Therefore, the early dynamics of the photoexcited $\text{NeBr}_2(\text{B}, \nu)$ complex consists of:

- i) the exponentially decay of the initial state within the time scale τ ,
- ii) the concomitant population of the vibrational levels $\nu + 1$ and $\nu - 1$ to a rather similar extent, with a slightly larger transition rate to the former.

Beyond the characteristic time scale τ , the coupling between the states $|\nu \pm 1\rangle$ to their neighbouring energy levels leads to an intricate vibrational energy redistribution process involving many levels. This picture is confirmed by a representative example of the vibrational population dynamics of the linear NeBr_2 complex upon photoexcitation of an intermediate vibrational state ($\nu = 23$), displayed in figure 2.

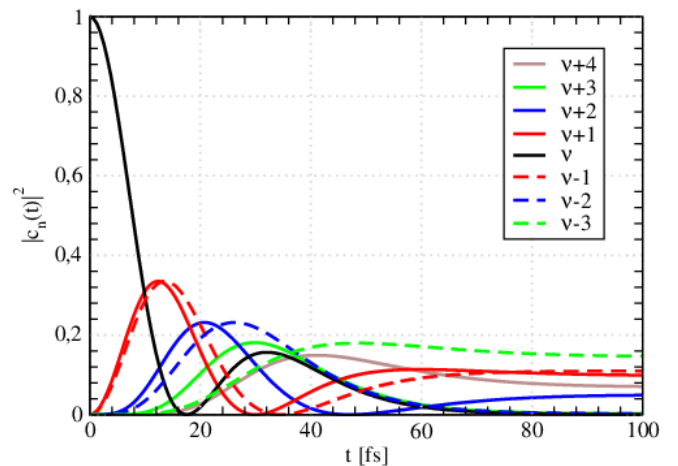


Figure 2. Time-dependent populations $|c_n(t)|^2$ of vibrational states of Br_2 upon photoexcitation of the collinear $\text{NeBr}_2(\text{B}, \nu = 23)$ complex.

In this specific example, the initial vibrational state decays completely within the first 17 fs after the photoexcitation,

populating the vibrational levels $\nu = 24$ and $\nu = 22$. The latter reaches a maximum population of 33%, and subsequently transfer it to vibrational levels $\nu = 25$, $\nu = 21$, and back to the initial state $\nu = 23$. The upcoming vibrational energy redistribution involves further closely-lying vibrational states, and the populations tend to stabilise after 100 fs.

III.2. Dissociation dynamics

The time evolution of quantum trajectories $R_i(t)$ upon photoexcitation is shown in figure 3, for the lowest ($\nu=14$) and the highest ($\nu=34$) initial vibrational quantum numbers considered here. The early quantum trajectory dynamics confirms that, conversely to the T-shape isomer, the photoexcited collinear $\text{NeBr}_2(\text{B},\nu)$ complex relaxes via direct dissociation.

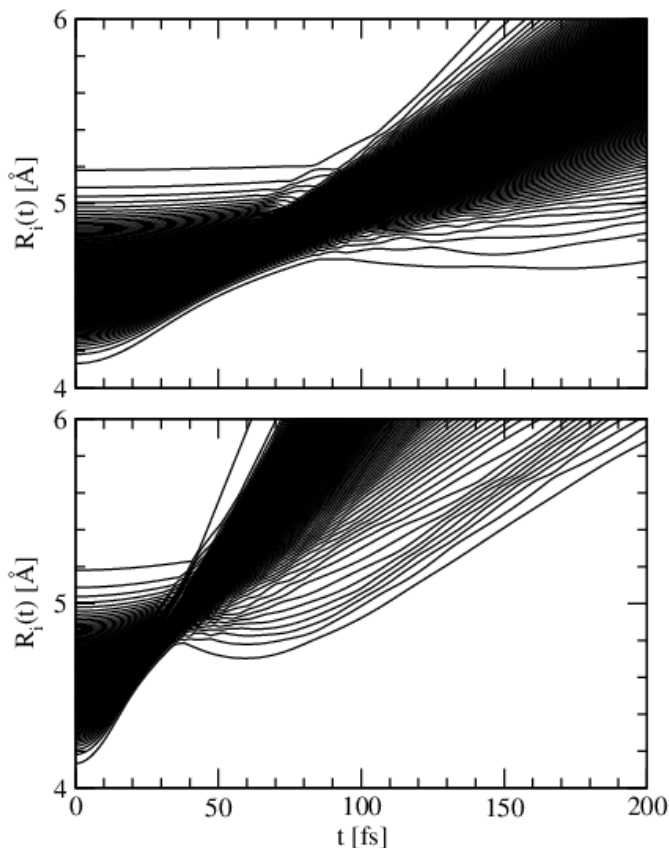


Figure 3. Time evolution of the interacting trajectories $R_i(t)$, for the collinear $\text{NeBr}_2(\text{B},\nu)$ complex, displaying the onset of the dissociation process upon photoexcitation of the vibrational levels $\nu = 14$ (top panel), and $\nu = 34$ (bottom panel).

The dissociation mechanism is similar for the two initial vibrational states represented in figure 3. First, the short-range repulsive forces between the Ne atom and the halogen moiety sets the inner quantum trajectories in motion while the outer trajectories remain fairly unaffected, thereby causing the overall distribution to get squeezed. The subsequent expansion of the swarm of trajectories is driven by the repulsive quantum force between neighbouring trajectories, and is characterized by a continuous growth of the centroid position of the distribution along the van der Waals mode.

The sensitivity of the time scale of the dissociation process to variations of the initial vibrational quantum number is apparent in figure 3. For the range of vibrational levels of the Br_2 molecule considered here ($\nu = 14 - 34$), the probability density distribution along the stretching mode r is chiefly concentrated around the classical turning points. Therefore, in the collinear van der Waals aggregate, increasing vibrational excitation causes the reduction of the average distance between the rare gas atom and the closest Br atom. Thus, the mean field potential $W_{\nu\nu}(R)$ is steeper at short range for the higher excited vibrational states of the Br_2 molecule. The enhanced repulsion for larger ν is responsible for driving the dissociation process faster.

The time-dependent dissociation probability (equation (5)) is plotted in figure 4. The $P_d^{(\nu)}(t)$ curves look like smoothstep functions. They show that the higher the initial vibrational excitation, the faster the dissociation process. In analogy with the exponential decay, we define the dissociation time scale τ_d as the time elapsed until the dissociation probability reaches 0.632. It can be seen, that $\tau_d(\nu)$ decreases linearly with the initial vibrational quantum number ν , and it is between 30 and 50 times larger than the corresponding lifetime of the initial vibrational state.

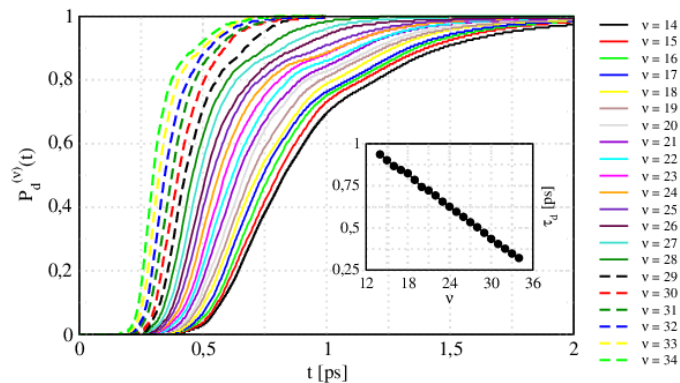


Figure 4. Dissociation probability $P_d^{(\nu)}(t)$ of the Ne atom from the collinear $\text{NeBr}_2(\text{B},\nu)$ complex. At each point in time, the dissociation probabilities strictly abide the inequalities $P_d^{(34)}(t) > P_d^{(33)}(t) > \dots > P_d^{(15)}(t) > P_d^{(14)}(t)$. The dissociation time $\tau_d(\nu)$ is shown in the inset.

IV. CONCLUSION

We report computer simulations of the photoinduced dissociation dynamics of collinear $\text{NeBr}_2(\text{B},\nu)$ van der Waals complex, for a wide range of initial vibrational states ($\nu = 14 - 34$) of the dihalogen. The calculations provide insight on the vibrational energy redistribution and on the dissociation pathway of the title system, whose dynamical properties can be difficult to measure using modern transient pump-probe spectroscopy experimental set-ups [8].

Upon photoexcitation, the initial vibrational state ν decays on a time scale $\tau \leq 30$ fs. The computed decay times follows the law $\tau(\nu) \sim \exp(-\kappa\nu)/\nu$ for vibrational quantum numbers up to $\nu = 28$. For higher vibrational states (i.e., $\nu \geq 29$), this functional form underestimates the transition rate. The

decay of the initial state triggers a complex vibrational energy redistribution process involving several neighbouring levels.

The interacting trajectory dynamics and time-dependent photodissociation probabilities display the direct character of the process. The dissociation time τ_d decreases linearly for increasing initial vibrational quantum number ν . The dissociation dynamics is sensitive to the initial vibrational state, yet it proceeds over a much longer time scale than the vibrational dynamics, attaining 100 % quantum yield after $\tau_d \gtrsim 1$ ps.

Contrarily to T-shape isomers undergoing predissociation, the photodissociation of collinear NeBr₂ complex is not driven by the vibrational relaxation of the dihalogen moiety. Because the linear isomer undergoes dissociation over a markedly shorter time scale compared to the T-shape complex, time-based discrimination may enable experimental detection of the former using time-resolved spectroscopy. Comparison of the results of numerical simulations as those reported here with the corresponding experimental signals opens the way to fine tune current models of the rare gas-dihalogen, excited-state interaction potentials in the repulsive region, and at linear configurations.

ACKNOWLEDGMENTS

The results incorporated in this publication have received funding from the European Union's Horizon 2020 and Horizon Europe research and innovation programmes, under the Marie Skłodowska-Curie grant agreements n°898663, and n°101155733, respectively.

REFERENCES

- [1] M. Maiuri, M. Garavelli, G. Cerullo, J. Am. Chem. Soc. **142**, 3 (2020).
- [2] F. Gatti, B. Lasorne, H.-D. Meyer, A. Nauts, *Applications of Quantum Dynamics in Chemistry* (Springer International Publishing, 2017).
- [3] T. Nagy, A. Vikár, G. Lendvay, Phys. Chem. Chem. Phys. **20**, 13224 (2018).
- [4] J. S. Briggs, A. Eisfeld, Phys. Rev. A **88**, 062104 (2013).
- [5] P. K. Chattaraj (Ed.), *Quantum Trajectories* (Taylor and Francis, 2010).
- [6] J. C. Acosta-Matos, C. Meier, A. Martinez-Mesa, L. Uranga-Piña, J. Phys. Chem. A **126**, 1805 (2022).
- [7] K. C. Janda, Predissociation of Polyatomic Van Der Waals Molecules. *Advances in Chemical Physics* **60**, 201 (2007).
- [8] J. Cabrera, C. R. Bieler, N. McKinney, W. E. van der Veer, J. M. Pio, K. Janda, O. Roncero, J. Chem. Phys. **127**, 164309 (2007).
- [9] J. C. Acosta-Matos, A. Martinez-Mesa, L. Uranga-Piña, Chem. Phys. **529**, 110544 (2022).
- [10] L. Cruz-Rodriguez, L. Uranga-Piña, A. Martinez-Mesa, C. Meier, Chem. Phys. **503**, 39 (2018).
- [11] J. M. Pio, W. E. van der Veer, C. R. Bieler, K. C. Janda, J. Chem. Phys. **128**, 134311 (2008).
- [12] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, M. Metcalf, *Numerical Recipes in Fortran 90 - The Art of Parallel Scientific Computing* (Cambridge University Press, 1996).
- [13] J. A. Cabrera, C. R. Bieler, B. C. Olbricht, W. E. van der Veer, K. C. Janda, J. Chem. Phys. **123**, 054311 (2005).
- [14] J. A. Beswick, N. Halberstadt, K. C. Janda, Chem. Phys. **399**, 4 (2012).

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



THE TWO-STATE DIFFUSION PROBLEM WITH RESETTING

REAJUSTE ESTOCÁSTICO PARA LA DIFUSIÓN EN DOS ESTADOS

J. J. DÍAZ-PÉREZ^{a†} AND R. MULET^b

a) Facultad de Matemática y Computación, Universidad de La Habana. jjdpbeat44@gmail.com[†]

b) Facultad de Física, Universidad de La Habana, Cuba. roberto.mulet@gmail.com

[†] corresponding author

Recibido 14/05/2024; Aceptado 30/08/2024

The concept of stochastic resetting emerged in 2011, introducing a simple modification to [15] the one dimensional Random Walk that leads to a stationary distribution and where the first-passage time can be easily optimized. In this context, we will investigate what happens when modeling these phenomena in a framework where a Brownian particle alternates between different states. We will derive the Fokker-Planck equations of the model and analyze the behavior of the probability density of the particle positions for long times and solve the corresponding first-passage time problem. Contrasting with the two-state Brownian motion, we will observe how resetting ensures a stationary behavior in the long run leading to a finite expectation for the first-passage problem. Finally, we will demonstrate how the existence of this expectation guarantees minimum values by varying the resetting or state-change parameters.

La idea del reajuste estocástico aparece en 2011 abriendo la posibilidad de interpretar un nuevo grupo de fenómenos, y sobre todo llamando la atención sobre las propiedades favorables de este tipo de modelos. Con este sentido estudiaremos qué sucede al modelar este tipo de fenómenos en un espacio de alternancia de los dos estados en que se mueve una partícula browniana. Deduiremos las ecuaciones de Fokker-Planck del modelo y a partir de ellas trabajaremos el comportamiento de la partícula para tiempos largos y el problema del primer cruce. En comparación con el movimiento browniano clásico en dos estados podremos ver cómo el reajuste nos garantiza un comportamiento estacionario para tiempos largos, y por tanto una esperanza finita para el problema del primer cruce. Por último, veremos como la existencia de la esperanza nos garantiza valores mínimos de esta al realizar variaciones sobre los parámetros de reajuste o cambio de estados.

PACS: Stochastic resetting (restablecimiento estocástico); double diffusivity (doble difusividad); first-passage time (tiempo de primer paso); Fokker-Planck Equation (ecuación de Fokker-Planck); brownian motion (movimiento browniano).

I. INTRODUCTION

The Brownian motion (BM) is one of the most studied stochastic processes of nature. It has been extensively used to model the molecular movement in a fluid [1], financial trends [2], animal foraging behavior [3], optimal search algorithms [4], and others. Among the various variations of the BM, in reference [5] the authors add to the Brownian motion a stochastic resetting process that follows a Poisson distribution. While the standard Brownian motion does not reach a stationary distribution, introducing a stochastic resetting provides to the process a stationary character and a finite expectation for the first-passage problem. These authors have also shown that there exists a value of resetting rate r that minimizes this expectation [5].

The idea of stochastic resetting has gained special relevance in the last decade due to its ability to describe a variety of processes in different disciplines. In this way, its incorporation can be observed in various variations of Brownian motion: drifted BM [6], scaled BM [7], and fractional BM [8]; as well as in different studies on animal behavior [9] and genome analysis [10].

To exemplify our problem, we can consider a miner searching for gold in a jungle as a high uncertainty environment. Let us assume that the miner motion is characterized by a diffusion constant, and that the value of this diffusion varies depending on whether it rains (low diffusion) or it is sunny.

This corresponds to a Brownian motion in a two state problem.

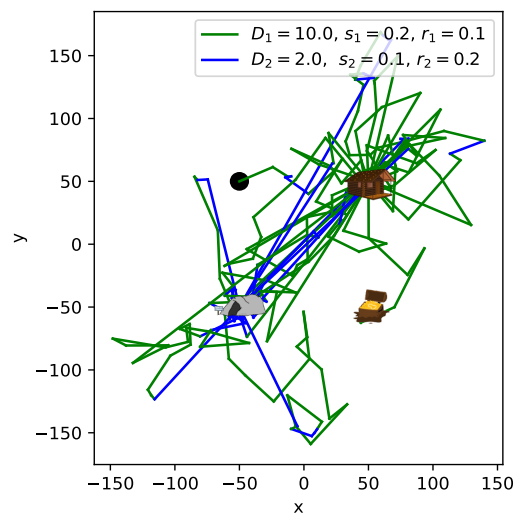


Figure 1. Trajectories of a miner searching for gold in a jungle. (-50,50) is the starting point of the miner. The house and the cave are the points to which he resets depending on whether the weather is sunny or rainy, respectively. The journey ends in this case when he finds the gold. The legend shows the diffusion constants in each state and the rates for resetting and state change.

The two-state problem has a significant body of work in the literature [11–13]. However, similar to the standard Brownian motion, this process will never reach a steady state, and the expectation of the first-passage time is also divergent [14]. Here, we will ask questions such as, what will happen if

the miner returns to a specific fixed point with a certain probability based on the weather conditions? How will the miner's search behavior evolve over long times? Will the expectation of the miner finding gold be finite? Is it significant that the resetting rate depends on the weather state? (see Figure 1).

We focus on the general one-dimensional modeling of Brownian motion with resetting in two states, addressing it in its most general form, which involves problems with two states and two resets to different positions [15]. Using the Fokker-Planck equation, we evaluate the system's behavior over long times. Then, by leveraging the stationary characteristics of the process, we explore the convergence of the first-passage expectation and the existence of a non-trivial minimum for a single resetting point. The primary reason for considering a single resetting point in the first-passage problem is to avoid added complexity in this initial approach. We chose to work with the relationship between diffusions rather than the relationship involving diffusion coefficients and reset points. Finally, we examine the behavior of this minimum across various parameter sets.

II. THE MODEL AND FOKKER-PLANCK EQUATION

Before obtaining the equations that will describe our Two-State Stochastic Resetting Brownian motion (BMR2S), let's frame its definition properly for one dimension. The problem to be addressed is that of a particle that starts at a point x_0 in state i with probability q_i , and for each moment $t \geq 0$, if it is in state i , at instant dt it can

- transit from state i to state $j \neq i$ with rate $s_j dt$ ($i, j = 1, 2$),
- move with BM of diffusion D_i ,
- reset its position to a fixed position x_i at a rate of $r_i dt$.

Let $P_i(x, t)$ denote the density function describing the probability of the particle in a BMR2S motion being at position x in state i at time t . Additionally, we will take $\phi_{\Delta t}^i(\Delta x)$ as the density function of the Brownian motion with diffusion D_i (i.e. a Gaussian function over Δx with distribution $N(0, 2D_i \Delta t)$), and $\mathcal{P}_i(t)$ as the probability of the particle being in state i at time t . The description of our BMR2S allows us to consider, for $\Delta t \ll 1$, the equations

$$P_i(x, t + \Delta t) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_{\Delta t}^i(\Delta x) P_i(x - \Delta x, t) d(\Delta x) + s_i \Delta t P_j(x, t) + r_i \Delta t \mathcal{P}_i(t) \delta(x - x_i) \quad (1)$$

for $i \neq j \in \{1, 2\}$ and $\delta(y)$ the Dirac delta function.

Regarding the functions $\mathcal{P}_i(t)$, it is sufficient to note that $\mathcal{P}_1(t) + \mathcal{P}_2(t) = 1$, and $\mathcal{P}_1(t)$ is given by

$$\mathcal{P}_1(t) = q_1 \exp[-t(s_1 + s_2)] + \frac{s_1 - s_1 \exp[-t(s_1 + s_2)]}{s_1 + s_2} \quad (2)$$

where q_1 represents the probability of starting in state 1. For simplicity, we set $q_1 = \frac{s_1}{s_1 + s_2}$, ensuring stationary behavior over time, i.e., $\mathcal{P}_i = \frac{s_i}{s_1 + s_2}$.

The three terms at (1) describe, in a time interval Δt , the possible arrivals at position x at time $t + \Delta t$. These are: the probability of moving in a BM with diffusion D_i , the probability of transitioning to state i from state j , and the probability of a resetting occurrence to position x_i . It is important to note that as $\Delta t \rightarrow 0$,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_{\Delta t}^i(\Delta x) d(\Delta x) + r_i \Delta t + s_j \Delta t \approx 1. \quad (3)$$

Proceeding similarly to the literature (see ref. [8]) on (1) and using (3), we obtain that the Fokker-Planck equations are, for $i \in \{1, 2\}$:

$$\frac{\partial P_i(x, t)}{\partial t} = D_i \frac{\partial^2 P_i(x, t)}{\partial x^2} - (r_i + s_j) P_i(x, t) + s_j P_j(x, t) + r_i \mathcal{P}_i(t) \delta(x - x_i). \quad (4)$$

with $j \neq i \in \{1, 2\}$. Once we have the Fokker-Planck equations derived, we can now address the behavior of $P_i(x, t)$ for long times and the first-passage time problem.

III. LONG-TIME DESCRIPTION

The probability density equation of the process as a function of position and time is given by $P(x, t) = P_1(x, t) + P_2(x, t)$. Due to the uniqueness of the solution [12] of our Fokker-Planck system (4), it is sufficient to find just one solution to the problem. We then perform both a Laplace and Fourier transforms to transform the partial differential equation in an algebraic expression whose inverse determines the probability density of the problem for all times. However starting from the well-known limit [16] it is straightforward to show that, if we denote as \mathcal{L} the Laplace transform,

$$\lim_{z \rightarrow 0} z \mathcal{L}[f(t)](z) = \lim_{t \rightarrow \infty} f(t), \quad (5)$$

that defines the stationary behavior of our function and avoids the complex calculation of the inverse of the transforms.

Computing the previous limit, we find that when taking $\Lambda_{\pm}^{\pm} = \sqrt{\lambda_{\pm}} e^{-\sqrt{\lambda_{\pm}} |x - x_i|} - \sqrt{\lambda_{\mp}} e^{-\sqrt{\lambda_{\mp}} |x - x_i|}$, with $\lambda_{\pm} = \frac{(s_1 + r_2)}{2D_2} + \frac{(s_2 + r_1)}{2D_1} \pm \sqrt{\left[\frac{(s_1 + r_2)}{2D_2} - \frac{(s_2 + r_1)}{2D_1} \right]^2 + \frac{s_1 s_2}{D_1 D_2}}$, our stationary distribution P_{ss} will be

$$P_{ss}(x) = \frac{r_1 s_1 \left(D_2 \sqrt{\lambda_+ \lambda_-} \Lambda_1^+ + (s_1 + s_2 + r_2) \Lambda_1^- \right)}{2D_1 D_2 (s_1 + s_2) \sqrt{\lambda_+ \lambda_-} (\lambda_+ - \lambda_-)} + \frac{r_2 s_2 \left(D_1 \sqrt{\lambda_+ \lambda_-} \Lambda_2^+ + (s_1 + s_2 + r_1) \Lambda_2^- \right)}{2D_1 D_2 (s_1 + s_2) \sqrt{\lambda_+ \lambda_-} (\lambda_+ - \lambda_-)}. \quad (6)$$

Unlike the case of two states without stochastic resetting, in our scenario, we will have a well-defined stationary state, the behavior of which can be observed in Fig. 2.

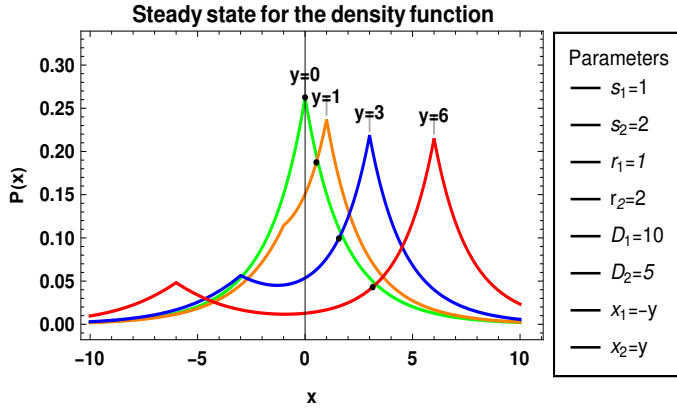


Figure 2. Behaviour of the density function (6) for a given set of parameters over very large times, i.e. as $t \rightarrow \infty$. The figure illustrates the relationships between the parameters and how they influence the behavior of the probability density function. In this case, $s_2 > s_1$, $r_2 > r_1$, and $D_1 > D_2$ contribute to a higher probability concentration around x_2 , meaning that the particle is more likely to stay near x_2 for long times. The black dots represent the expected value for each probability density function.

If we quickly review equation (6), we observe that there are two weights, one for each x_i . By adjusting the parameters D_i , r_i , and s_i , we can see how these weights vary almost proportionally (inversely for D_i and directly for r_i and s_i). In summary, if we look at *probability concentration* around x_i as the probability that the particle is within some vicinity of x_i , we find that:

- $D_i > D_j$ results in a lower probability concentration at x_i with respect to x_j ,
- $r_i > r_j$ leads to a higher probability concentration at x_i with respect to x_j ,
- $s_i > s_j$ leads to a higher probability concentration at x_i with respect to x_j ,
- If $x_1 = x_2$, $r_1 = r_2$, and $D_1 = D_2$, the behavior is the same as for a single state with resetting.

IV. FIRST-PASSAGE TIME PROBLEM

The mean first-passage time of a stochastic process is defined in the following way: given a stochastic process $X(t)$ with initial condition $x_0 > 0$, what is the expectation of the random variable representing the first passage time to $x = 0$? In short, the expectation of the random variable $t_f = \inf_t \{X(t) \leq 0\}$.

To compute this quantity we make use of the well-known Chapman-Kolmogorov equation for Markov stochastic processes,

$$P(0, t|x_0, 0) = \int_0^t \mathbb{F}(x_0, \tau)P(0, t|\tau, \tau) d\tau, \quad (7)$$

where P and \mathbb{F} represent the probability densities of the process under consideration and the first-passage, respectively. To calculate the expectation of the first-passage

$T(x_0)$, we exploit a formula previously derived from the properties of the Laplace Transform and the survival probability function [8, 14],

$$T(x_0) = \lim_{z \rightarrow 0} \frac{1 - \hat{\mathbb{F}}(x_0, z)}{z}. \quad (8)$$

In other words, given the equation (7), we only need the Laplace transform of \mathbb{F} to calculate T . This is not difficult, because of the Laplace Transform of a convolution of two functions is the product of the Laplace transform of these functions.

The limit of equation (8) is confirmed to exist if at least one of the inequalities $r_1 s_1 \neq 0$ or $r_2 s_2 \neq 0$ holds. This means that there must be at least one state with non-zero stochastic resetting and a non-zero rate of transition to it.

Next, we derive the equation for the expectation T and simplify it by introducing the substitutions $\alpha = \frac{D_1}{D_2}$ and $\theta = \frac{x_0}{\sqrt{D_2}}$. Here, α denotes the ratio of diffusions in both states, and θ represents the relationship between the resetting position and the displacement. Consequently, our expression for the expectation (8) can be simplified to $T = \frac{\Psi}{\Phi}$, where

$$\begin{aligned} \Psi &= \sqrt{\mu_+} (1 - e^{-\sqrt{\mu_-}\theta}) [\beta - (s_1 + s_2\alpha)\mu_-] \\ &\quad - \sqrt{\mu_-} (1 - e^{-\sqrt{\mu_+}\theta}) [\beta - (s_1 + s_2\alpha)\mu_+] \\ \Phi &= \sqrt{\mu_+} e^{-\sqrt{\mu_-}\theta} [\gamma - (r_1 s_1 + \alpha r_2 s_2)\mu_-] \\ &\quad - \sqrt{\mu_-} e^{-\sqrt{\mu_+}\theta} [\gamma - (r_1 s_1 + \alpha r_2 s_2)\mu_+] \end{aligned} \quad (9)$$

with $\mu_{\pm} := \frac{\alpha(s_1+r_2)+(s_2+r_1) \pm \sqrt{[\alpha(s_1+r_2)-(s_2+r_1)]^2 + 4\alpha s_1 s_2}}{2\alpha}$, $\beta = (s_1 + s_2)^2 + s_1 r_2 + s_2 r_1$ and $\gamma = (s_1 + s_2)(r_1 s_1 + r_2 s_2 + r_1 r_2)$.

With this expression, we then ask, in a similar way as in ref. [5], whether the expectation of the first-passage time can be minimized by adjusting the resetting parameters r_1 and r_2 . To address this, we numerically compute the values of r_1 and r_2 that minimize T for specific parameter sets. As mentioned at the beginning, we assume in this case that $x_0 = x_1 = x_2$.

Let's denote this minimum of T as T_m . Subsequently, we compare this with the outcome of optimizing T considering a single parameter $r = r_1 = r_2$. In this case, the miner returns to its original position at a rate that does not depend on its state. We denote this minimum as T_r . These two values are compared with the extreme cases, i.e., with the prediction obtained in ref. [5] for one state. We denote this time as: $T = T_e$ and is obtained when $r_i = r_i^* = \frac{c^2 D_i}{x_0^2}$, where $c \approx 1.5441$. It is not difficult to verify that these r_i^* values yield the minimum of T when our two-state process can be simplified to a single diffusion process—either due to equivalent diffusions in both states (i.e., $D_1 = D_2$) or when the mean time in one of the two states is zero (i.e., $s_1 s_2 = 0$).

Let us first examine how T_e depends on α , θ , s_1 , and s_2 . If we fix θ and increase the value of α , it is equivalent to enhancing the diffusion in one of the states. In this scenario, as diffusion increases, the expectation time decreases, indicating

an increased probability of an earlier occurrence of the first-passage (see Figure 3).

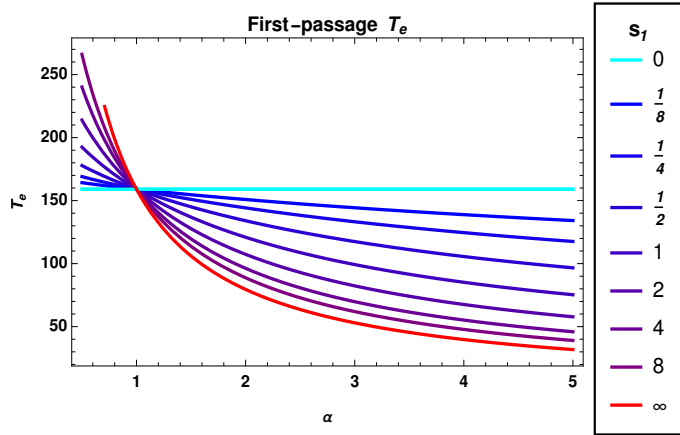


Figure 3. Dependence of T_e on α for different values of s_1 . In all cases, $\theta = 10$ and $s_2 = 2$ are used. It can be checked that when $\alpha = 1$, the resetting point is unique, and the minimum $T_m = T_e$ remains constant regardless of the values of s_1 and s_2 . For the extreme cases $s_1 = 0$ and $s_1 = \infty$, it can be verified that these are equivalent to a scenario in which there is a transition between the two states, but both have equal diffusion. Specifically, $s_1 = 0$ corresponds to the case where both states have diffusion D_2 , and $s_1 = \infty$ corresponds to the case where both states have diffusion $D_1 = \alpha D_2$. In both cases, the values of the parameters s_1 and s_2 do not affect the expected value.

On the other hand, for $\alpha > 1$, we observe that the expectation T_e will be bounded below by the case where $\frac{s_1}{s_2} \rightarrow \infty$, representing a situation in which the particle primarily moves in the state with large diffusion. It can be verified that the global minimum of T , when optimizing over (s_1, s_2, r_1, r_2) , is T_e as $\frac{s_1}{s_2} \rightarrow \infty$. The alternative scenario occurs when $\frac{s_1}{s_2} \rightarrow 0$, which corresponds to the particle spending most of its time in the state with low diffusion. Figure 3 illustrates how the values of $\frac{s_1}{s_1+s_2}$ and $\frac{s_2}{s_1+s_2}$ function as a kind of weighted average between the two extremes, $\frac{s_1}{s_2} \rightarrow \infty$ and $\frac{s_1}{s_2} \rightarrow 0$. Overall, this reinforces the notion that a larger *average diffusion* leads to a reduction in the expectation value of the first-passage time.

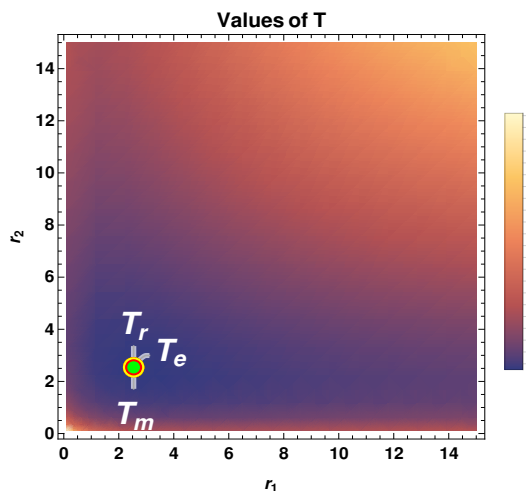


Figure 4. Values of $T(r_1, r_2)$ given the values of $(s_1, s_2, \alpha, \theta) = (1, 2, 1, 1)$. It can be observed how the values of T_m, T_r , and T_e coincide, starting from the condition $\alpha = 1$. As shown in Figure 3, it can also be analytically verified that the values of s_1 and s_2 have no impact on the outcome.

In terms of the miner's logic, this would imply, as a first

approximation, that the higher the ratio of sunny to rainy days—favoring sunny weather—the probability of finding the gold mine increases with the number of sunny days and reaches its maximum when it never rains. Let's now see what happens optimizing with respect to the two resetting parameters (r_1, r_2) . We first look to the case $\alpha = 1$ (i.e. $D_1 = D_2$). In this scenario, setting $r = r_1 = r_2$ in the expression of T (9), it can be shown analytically that the optimal solution is achieved when $r = r_1^* = r_2^*$. Under this condition, $T_r = T_e$. Moreover, we can show that optimizing with respect to both parameters, r_1 and r_2 , is equivalent to fix them to $r_1 = r_1^*$ and $r_2 = r_2^*$. Therefore, for $D_1 = D_2$ and a single resetting point, the values of T_r, T_m , and T_e coincide (see Figure 4).

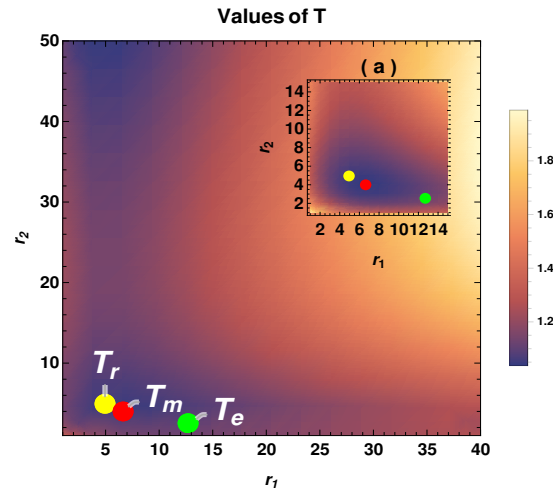


Figure 5. Values of $T(r_1, r_2)$ analyzed for $(s_1, s_2, \alpha, \theta) = (1, 2, 5, 1)$. In (a), the graph is enlarged around which T_m, T_r , and T_e are found. It is important to note that in this case, T_m as a minimum is taken locally, that is, it is numerically calculated taking T_r as the starting point, so T_m is not necessarily a minimum over $(r_1, r_2) \in \mathbb{R}_+^2$.

Now, let's assume without loss of generality, that $\alpha > 1$. Initially, as shown in Figure 5.a, for the parameter values $(s_1, s_2, \alpha, \theta) = (1, 2, 5, 1)$, there exists a local minimum T_m reached when $r_1 \neq r_2$. This local minimum, a candidate for T_m , is already lower than both T_r and T_e (Figure 5). Moreover, it is notable from Figure 5 that beyond a certain threshold of r_2 , the values of T starts to decrease, indicating the possibility of another global minimum.

Indeed, numerous numerical simulations show that letting $r_2 \rightarrow \infty$ often yields a global minimum. What does this mean? When $r_2 \rightarrow \infty$, it effectively removes diffusive movement in state 2 (the state with lower diffusion). Each time the system enters state 2, the particle immediately resets to position x_0 and remains there for an exponential period corresponding to the time spent in state 2. Movement resumes only when transitioning to state 1. In the miner language: *do not go outside if it's raining*.

To deduce the value of r_1 for which T reaches its minimum when $r_2 \rightarrow \infty$, let's observe that the transition to state 2 acts as a resetting at a rate of s_2 , and the time spent in state 2 serves as a penalty on the first-passage time, as the particle remains at x_0 . This scenario becomes equivalent to a stochastic resetting with one diffusion state process, where the resetting

parameter is $r_1 + s_2$, and for each trajectory, each transition to s_2 penalizes the time of the first-passage with an exponential random variable of parameter s_1 .

Therefore, the minimum would be given by the optimal resetting with respect to the single-state diffusion problem [5], taking into account the value of the state change. That is, when $r_2 \rightarrow \infty$, the optimal value for r_1 will be given by

$$r_1 = \max\left\{0, \frac{c^2 D_1}{x_0^2} - s_2\right\}. \quad (10)$$

The fact that 0 is the best value when $\frac{c^2 D_1}{x_0^2} - s_2 < 0$ results from the monotonicity of the expectation over the resetting parameter for the single-state problem, as in such a case the parameter s_2 will act as the resetting parameter.

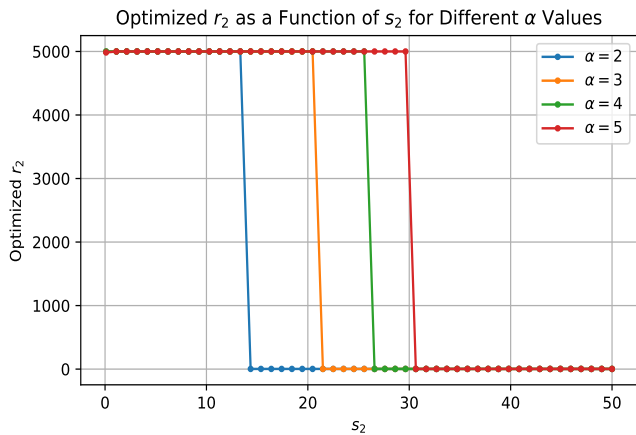


Figure 6. Optimized $\theta = 1$ and a function of $s_1 = 2$ for different $\alpha = 2, 3, 4, 5$ values. The calculations are performed numerically, with 5000 used to represent a sufficiently large value that approximates $r_2 \rightarrow \infty$. When r_2 decreases, it reaches a local minimum, as shown in Figure 5, so r_2 is greater than zero but very small compared to 5000 in this case. It can be observed the phase transition of r_2 based on the values of s_2 .

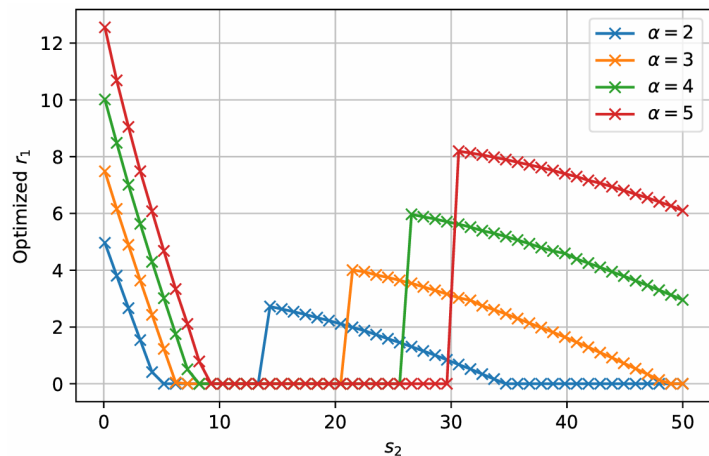


Figure 7. For $\theta = 1$ and $s_1 = 2$, this figure illustrates the behavior of r_1 as a function of s_2 for $\alpha = 2, 3, 4, 5$. Initially, r_1 decreases linearly to zero, consistent with Equation (10). Beyond a critical s_2 point, the local minimum becomes the global minimum, resulting in a jump to a non-zero r_1 value, which then begins to decrease again.

Examining the global minimum between the local candidate and the candidate obtained by letting r_2 tend to infinity, we

observe a transition that depends on the relationship between s_1 and s_2 . Specifically, if we fix s_1 we find that for low values of s_2 (i.e., less time in state 2), letting r_2 tend to infinity yields the global minimum. However, for high values of s_2 (i.e., when it 'rains' frequently, in terms of the miner's logic), the local minimum actually represents the global minimum (see Figure 6).

Moreover, we see in Figure 7 that the behavior of r_1 aligns with the prediction made in Equation (10), specifically for the values where $r_2 \rightarrow \infty$ in Figure 6. In this case, r_1 decreases linearly as a function of s_2 until it reaches zero. However, after the transition point, where r_2 becomes finite in relation to s_2 , a local minimum appears for both r_1 and r_2 , with $r_1 \neq 0$. Beyond this point, for sufficiently large values of s_2 , r_1 decreases until, for sufficiently large values of s_2 , r_2 returns to zero.

V. CONCLUSIONS

In this article, we have summarized key findings from our work on two central aspects of a Brownian Motion with stochastic resetting in two states: the long-term behavior and the first-passage problem. We began by deriving the Fokker-Planck equations that characterize these processes using their Markovian properties. From these equations, we obtained the stationary state density function, along with an example illustrating the density's behavior across different parameter sets, highlighting how various parameters influence the density function.

For the first-passage problem, we derived a general expectation equation for the process and simplified the analysis by reducing the dynamics to a case where the two resetting points coincide, allowing for more direct comparison. We established that the expectation for the process is bounded by the expectations for single-diffusion cases, and we examined the monotonic behavior of $T(s_i)$ while keeping s_j fixed. We then analyzed how the expectation behaves relative to the values of r_1 and r_2 , as well as the roles of the parameters s_1 , s_2 , and α . Notably, we found that while the minimum candidates for the expectation coincide when $\alpha = 1$, this is not the case for $\alpha \neq 1$.

Our main results reveal that the resetting rates exhibit two distinct states separated by a well-defined transition, depending on the relationships between α , s_1 , and s_2 . These states correspond to cases where r_2 tends to infinity and where r_2 remains finite.

REFERENCES

- [1] M. Scott, Applied Stochastic Processes in Science and Engineering (University of Waterloo, 2013).
- [2] T. Mikosch, Elementary Stochastic Calculus with Finance in View, Volume 6 (World Scientific, 2004).
- [3] O. Bénichou, M. Coppey, M. Moreau, P.-H. Suet, and R. Voituriez, Phys. Rev. Lett. **94**, 198101 (2005).
- [4] R. A. Murphy, arXiv:1704.00207v2 (2017).
- [5] M. R. Evans and S. N. Majumdar, Phys. Rev. Lett. **106**, 160601 (2011).

- [6] W. Guo, H. Yan, and H. Chen, arXiv:2311.14714v1 (2023).
- [7] A. V. Chechkin, A. S. Bodrova, and I. M. Sokolov, *Phys. Rev. E* **100**, 012120 (2019).
- [8] S. Gupta and A. M. Jayannavar, arXiv:2106.07693v2 (2022).
- [9] A. Pal, L. Kuśmierz, and S. Reuveni, *Phys. Rev. Research* **2**, 043174 (2020).
- [10] D. Sánchez-Taltavull, É. Roldan, A. Lisica, and S. W. Grill, *Phys. Rev. E* **93**, 062411 (2016).
- [11] E. C. Aifantis and J. M. Hill, *Quart. J. Mech. Appl. Math.* (1980).
- [12] A. I. Lee and J. M. Hill, *J. Math. Analysis Appl.* **89**, 530–557 (1982).
- [13] B. D. Hughes, *Random Walks and Random Environments*, Volume 1 (Clarendon Press, Oxford, 1995).
- [14] J. J. Díaz and R. Mulet, “Stochastic Resetting for the Two States Brownian Motion Problem,” Diploma Thesis, Universidad de La Habana, La Habana, 2024.
- [15] L. Dagdug, P. J. Salgado, and D. Boyer, arXiv:2311.11897v1 (2023).
- [16] J. M. Almira, *Matemáticas para la Recuperación de Señales* (Grupo Editorial Universitario, 2005).

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



ON THE VARIABLE MASS PROJECTILE MOTION

SOBRE EL MOVIMIENTO DE UN PROYECTIL CON MASA VARIABLE.

VLADIMIR IVCHENKO^{a†}

Department of Natural Sciences Training, Kherson State Maritime Academy, Kherson 73000, Ukraine reterty@gmail.com[†]
[†] corresponding author

Recibido 14/3/2024; Aceptado 29/9/2024

We consider the features of the translatory motion of a rocket. It is found that its trajectory can have an inflection point or even contain an S-shaped section in the case of the relatively low initial speed. Both these features are explained by the fact that initially, the vertical component of the constant thrust is less than the gravity force, however, due to fuel consumption, it becomes greater than gravity. The times corresponding to the trajectory local extrema are determined using the Lambert W -function.

Consideramos las características del movimiento de traslación de un cohete. Se ha comprobado que su trayectoria puede tener un punto de inflexión o incluso contener una sección en forma de S en el caso de una velocidad inicial relativamente baja. Ambas características se explican por el hecho de que inicialmente la componente vertical del empuje constante es menor que la fuerza de gravedad, sin embargo, debido al consumo de combustible, se vuelve mayor que la fuerza de gravedad. Los tiempos correspondientes a los extremos locales de la trayectoria se determinan utilizando la función W de Lambert.

PACS: General physics (physics education), 01.55.-b; Newtonian mechanics, 45.20.D-; Ballistics (projectiles; rockets), 45.40.Gj

I. INTRODUCTION

Projectile motion is one of the basic topics that are considered in the introductory mechanics course. There are many variations of this problem namely: drag-free projectile motion [1]; projectile motion in the presence of both linear [2] and quadratic drag [3], [4]; wind-influenced projectile motion [5]; projectile motion affected by the Magnus force [6]; relativistic projectile motion [7], the added mass of a spherical projectile [8], etc.

There are also many sources considering the examples of variable mass motion in the presence of gravity. Mungan and Lipscombe [9] analyze the interesting case of the vertical launch of a grappling hook. The features of the vertical launch of a rocket in a gravitational field are described in [10] and [11] (p. 139).

In this paper, we consider two-dimensional motion (projectile motion) with constant thrust and the simplest possible approximation in which the rocket mass linearly decreases with time. The problem is best suited for the beginning of an upper-level undergraduate course in classical mechanics.

II. THEORY

If we consider a rocket launched at an angle to the horizon with a constant thrust force throughout its ascent and descent phases, it is possible to achieve a translatory motion, where the reactive force remains in the same direction all the time. However, it's important to note that this scenario would require specific conditions and considerations.

To achieve a translatory motion, the rocket's thrust vector must be angled appropriately relative to its velocity vector at each point in its trajectory. By controlling the direction of the thrust, it is possible to balance the gravitational force and

achieve a curved path that maintains a constant direction of the reactive force.

One way to achieve this is by employing a guidance system that adjusts the direction of the rocket's engines to maintain the desired trajectory. This guidance system continuously calculates the necessary adjustments to the thrust vector based on factors such as the rocket's position, velocity, and desired path. By dynamically changing the direction of the thrust, the rocket can follow a curvilinear path while keeping the reactive force consistently oriented in the same direction.

It is worth noting that achieving and maintaining such a trajectory requires sophisticated control systems, precise calculations, and real-time adjustments. Additionally, other factors like atmospheric conditions, external forces, and the rocket's aerodynamic properties influence the actual trajectory and make it challenging to achieve a perfect curvilinear translational motion. Another practically important variant of rocket motion is the case when the speed and thrust are always co-directed. However, this movement model is much more complex in terms of mathematical description.

Let us consider a body with the initial mass m_0 that moves in xy -plane under two forces: the jet force and the gravity force. Now, we should employ the equation of variable-mass motion (the rocket thrust equation). The reader may not be familiar with this equation. In this regard, we can suggest for the familiarization Ref. [11] (pp. 136-138) or Ref. [12], where a detailed derivation and analysis of this equation are presented (there is a small mistake in one slide of Ref. [12], that is corrected later in the video). In our case, the equation of variable-mass motion reads as:

$$m(t) \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{dm}{dt} \mathbf{v}_{\text{rel}} + m(t)\mathbf{g}, \quad (1)$$

where \mathbf{v} is the rocket velocity; \mathbf{v}_{rel} is the exit velocity of the combustion products relative to the rocket. The first term on

the right side of equation (1) is the thrust, while the second one represents the gravity force.

Assuming for simplicity that the body mass decreases linearly with time (this assumption gives us a constant thrust), we have:

$$m(t) = m_0 - kt \geq 0, \quad (2)$$

so that derivative $dm/dt = -k = \text{const}$ ($k > 0$). Since, $m(t)$ should remain positive all the time, we limit the flight time to the interval $0 \leq t < m_0/k$.

We denote the constant angle between the thrust (that is, the rocket's symmetry axis) and x -axis as α_0 ($0 \leq \alpha_0 \leq \pi/2$). This means that the rocket performs a purely translatory motion. Although this case is not of great practical importance, the problem is easily solvable in such a formulation. In all other cases we deal with a set of non-linear differential equations of motion. In addition, in reality there will be a moment of air resistance force that will tend to rotate the rocket. This effect is caused by the fact that the center of mass and the center of air resistance do not coincide. To eliminate this effect, it will be necessary to use the system of active stabilization of the rocket flight.

The vector equation (1) splits into two independent scalar equations:

$$m(t) \frac{dv_x}{dt} = kv_{\text{rel}} \cos \alpha_0, \quad (3)$$

$$m(t) \frac{dv_y}{dt} = kv_{\text{rel}} \sin \alpha_0 - m(t)g. \quad (4)$$

Solving equations (2)-(4) along with initial condition $v(0) = v_0$, we get:

$$v_x = \left[v_0 - v_{\text{rel}} \ln \left(1 - \frac{kt}{m_0} \right) \right] \cos \alpha_0, \quad (5)$$

$$v_y = \left[v_0 - v_{\text{rel}} \ln \left(1 - \frac{kt}{m_0} \right) \right] \sin \alpha_0 - gt. \quad (6)$$

As far as the initial rocket velocity is non-zero, the model system used in this paper could be related with the movement of the second or further stage in a multi-stage launch. Using initial conditions $x(0) = 0$, $y(0) = 0$, and integrating equations (5) and (6) over time, we find:

$$x = \left[(v_0 + v_{\text{rel}})t + v_{\text{rel}} \left(\frac{m_0}{k} - t \right) \ln \left(1 - \frac{kt}{m_0} \right) \right] \cos \alpha_0, \quad (7)$$

$$y = \left[(v_0 + v_{\text{rel}})t + v_{\text{rel}} \left(\frac{m_0}{k} - t \right) \ln \left(1 - \frac{kt}{m_0} \right) \right] \sin \alpha_0 - \frac{gt^2}{2}. \quad (8)$$

At $v_{\text{rel}} \rightarrow 0$ and $k \rightarrow 0$ (that is, in the case of zero thrust), expressions (5)-(8) are transformed into ordinary equations describing free projectile motion.

Let us introduce a set of dimensionless variables to reduce the number of input parameters to the problem and make the analysis of the equations of rocket motion simpler. We denote: $u_{x,y} = v_{x,y}/v_{\text{rel}}$ is the dimensionless instant speed; $u_0 = v_0/v_{\text{rel}} > 0$ is the dimensionless initial speed; $\tau = kt/m_0$ is the dimensionless time ($0 \leq \tau < 1$); $j = m_0g/(kv_{\text{rel}})$ is the dimensionless acceleration; $\rho_x = kx/(m_0v_{\text{rel}})$, $\rho_y = ky/(m_0v_{\text{rel}})$ are the dimensionless Cartesian coordinates. In this case, equations (5)-(8) can be rewritten as:

$$u_x = [u_0 - \ln(1 - \tau)] \cos \alpha_0, \quad (9)$$

$$u_y = [u_0 - \ln(1 - \tau)] \sin \alpha_0 - j\tau, \quad (10)$$

$$\rho_x = [(u_0 + 1)\tau + (1 - \tau) \ln(1 - \tau)] \cos \alpha_0, \quad (11)$$

$$\rho_y = [(u_0 + 1)\tau + (1 - \tau) \ln(1 - \tau)] \sin \alpha_0 - \frac{j\tau^2}{2}. \quad (12)$$

Considering equations (11), (12), and taking into account the equality

$$\lim_{\tau \rightarrow 1} (1 - \tau) \ln(1 - \tau) = 0, \quad (13)$$

we have for values of τ close to 1:

$$\rho_y \approx \rho_x \tan \alpha_0 - \frac{j}{2}. \quad (14)$$

Therefore, the idealized body's trajectory is enclosed between line $\rho_y = \rho_x \tan \alpha_0$ and the line given by equation (14) (figure 1).

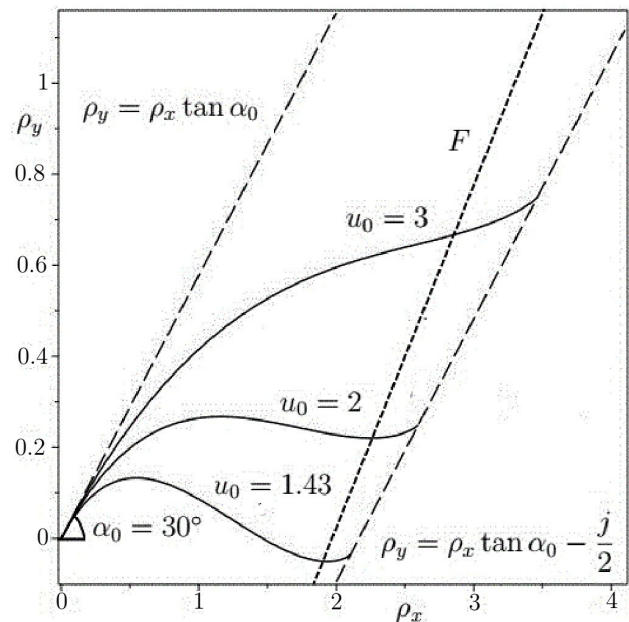


Figure 1. The body's trajectory at $\alpha_0 = 30^\circ$, $j = 2.5$, and different values of u_0 . The solid lines are drawn for $0 \leq \tau \leq 1$.

It should be noted that in reality the assumption $\tau \rightarrow 1$ is unattainable, since the rocket engine has non-vanishing mass.

For example, for rockets using dense components such as liquid oxygen and kerosene as fuel, the ratio of fuel mass to structural mass reaches 20 : 1. For rockets powered by oxygen and hydrogen, this ratio is about 10 : 1. Taking this fact into account, we introduce dashed line F in figure 1 to approximately separate sections of trajectories with non-zero fuel mass from those parts where our model no longer correctly describes the movement.

At fixed values of α_0 , j , and relatively high value of u_0 , curve $\rho_y(\rho_x)$ has an inflection point (figure 1). As u_0 decreases, two local extrema (maximum and minimum) appear on this curve. With a further decrease in the initial speed u_0 , the minimum shifts to the region of negative values of ρ_y (figure 1).

The time points at which these local extrema are reached can be found by solving equation $u_y(\tau) = 0$, where function $u_y(\tau)$ is given by equation (10). We have:

$$\beta\tau = u_0 - \ln(1 - \tau), \quad (15)$$

where $\beta = j / \sin \alpha_0 > 0$. The equation (15) can be rewritten as:

$$-\beta(1 - \tau) = u_0 - \beta - \ln(1 - \tau). \quad (16)$$

Converting this equation to exponential form, we derive:

$$-\beta(1 - \tau) \exp(-\beta(1 - \tau)) = -\beta \exp(u_0 - \beta). \quad (17)$$

Expression (17) is the equation relative to unknown variable τ and it has the formal form: $w \exp(w) = z$, where $w = -\beta(1 - \tau)$, $z = -\beta \exp(u_0 - \beta)$. The solution to this transcendental equation (relative to variable w) is not expressed in terms of elementary functions and is known as the multivalued Lambert $W(z)$ -function (also called the omega function, product logarithm, or the inverse function) [13], [14] with respect to the variable z . Thus,

$$-\beta(1 - \tau) = W[-\beta \exp(u_0 - \beta)]. \quad (18)$$

Then

$$\tau = \frac{W[-\beta \exp(u_0 - \beta)] + \beta}{\beta}. \quad (19)$$

Since, in our case both argument z and solutions $W(z)$ should be real numbers (moreover, z is always negative), we deal with only two branches of $W(z)$ [14]. The principal branch (W_0) corresponds to the local minimum and gives the values between -1 and 0 , whereas the lower branch (W_{-1}) corresponds to the local maximum and gives the values below -1 . Therefore,

$$\tau_{\max} = \frac{W_{-1}[-\beta \exp(u_0 - \beta)] + \beta}{\beta}, \quad (20)$$

$$\tau_{\min} = \frac{W_0[-\beta \exp(u_0 - \beta)] + \beta}{\beta}, \quad (21)$$

In order to put in context the results, we turn back to the original variables in equations (20), (21):

$$t_{\max} = \frac{m_0}{k} + \frac{v_{\text{rel}} \sin \alpha_0}{g} W_{-1} \left[-\frac{m_0 g}{k v_{\text{rel}} \sin \alpha_0} \exp \left(\frac{v_0}{v_{\text{rel}}} - \frac{m_0 g}{k v_{\text{rel}} \sin \alpha_0} \right) \right],$$

$$t_{\min} = \frac{m_0}{k} + \frac{v_{\text{rel}} \sin \alpha_0}{g} W_0 \left[-\frac{m_0 g}{k v_{\text{rel}} \sin \alpha_0} \exp \left(\frac{v_0}{v_{\text{rel}}} - \frac{m_0 g}{k v_{\text{rel}} \sin \alpha_0} \right) \right]. \quad (23)$$

It is known [14] that for negative values of z these two branches of $W(z)$ -function are defined only on interval $-1 / \exp(1) \leq z \leq 0$. Then, the condition for the existence of both extrema is the following inequality: $\beta > \exp(\beta - u_0 - 1)$ or

$$u_0 < \beta - \ln \beta - 1. \quad (24)$$

For $u_0 = \beta - \ln \beta - 1$, $\tau_{\max} = \tau_{\min} = (\beta - 1) / \beta$ (here we used the special values of two branches: $W_0(-1/e) = W_{-1}(-1/e) = -1$). If $u_0 > \beta - \ln \beta - 1$, both extrema are absent. The above analysis implies that $\beta > 1$. For $0 < \beta < 1$ both solutions (20) and (21) are negative and are not relevant for our consideration.

Figure 2 shows the dependences of the solutions of equations (20) and (21) (the extrema points τ_{extr}) on u_0 constructed at two different values of β . At fixed value of β , τ_{\max} (τ_{\min}) is a monotonically increasing (decreasing) function of u_0 . As β increases, the values of τ_{\max} (τ_{\min}) decrease (increase) rapidly.

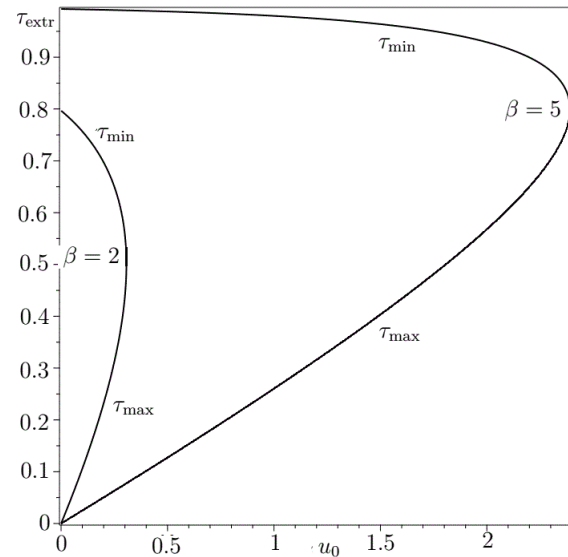


Figure 2. The solutions (20), (21) as functions of u_0 at two different values of β .

III. DISCUSSION

Let us consider equations (3) and (4). Equation (4) tells us that under the influence of the horizontal component of the thrust v_x increases all the time. At the same time, the vertical component v_y of the velocity can change non-monotonically. Indeed, if the vertical component of the thrust ($k v_{\text{rel}} \sin \alpha_0$) is greater all the time than the gravity force ($m_0 g$), then v_y increases all the time. If $k v_{\text{rel}} \sin \alpha_0 < m_0 g$, then v_y is diminishing from the start. However, due to fuel

consumption, the mass of the rocket decreases and at a certain point in time t_0 , v_y begins to increase. This time can be found from the condition $kv_{\text{rel}} \sin \alpha_0 = (m_0 - kt_0)g$:

$$t_0 = \frac{m_0}{k} - \frac{v_{\text{rel}} \sin \alpha_0}{g}, \quad (25)$$

or $\tau_0 = 1 - 1/\beta$. The time t_0 corresponds to the inflection point on the trajectory (figure 1).

If, moreover, $v_0 \sin \alpha_0$ is relatively small, then v_y has time to go to zero (a local maximum on the trajectory) at time t_0 and then become negative (the rocket will descend for some time). Subsequently, v_y becomes positive again and the rocket begins to ascend (the beginning of this interval corresponds to a local minimum on the trajectory).

We can provide a physical motivation for equation (22) by asking what the minimum launch velocity u_0 is such that the rocket will not fall back down and so the curves in figure 1 show no extrema. It follows from figure 2 that for $\beta = 5$ the minimum value of u_0 is equal to 2.5, whereas for $\beta = 2$ the minimum value of u_0 is approximately equal to 0.35.

It is seen from figure 1 that for $u_0 = 1.43$, ρ_y turns negative meaning that the rocket crashes unless you have launched it off a cliff. An interested student might ask "What is the minimum initial velocity to avoid $\rho_y < 0$?". Similarly, a student might wonder what the trajectory looks like when dimensionless time is large enough that the rocket runs out of fuel. We can suggest these topics as students' homework or even as an independent project.

IV. CONCLUSIONS

The variable mass projectile motion is a topic that is possibly not explored deeply enough in undergraduate physics degree curricula. In this paper, we try to fill this gap. The topic may help students to better grasp such important physical concepts as translational motion, thrust, trajectory, projectile motion,

etc. Finally, our consideration should help readers to observe the differences between the classical projectile motion and the trajectory of a rocket.

The topic can be recommended to students for further reading when studying dynamics of systems with varying mass or in physics electives. This issue can also be used as an undergraduate project.

REFERENCES

- [1] H. Young and R. Freedman, University Physics (San Francisco, CA: Pearson Education Inc., 2004), p. 87.
- [2] Said Annasi Ayubu, Mshewa Msafiri Mmasa, Mwakipunda Grant Charles, Ngata Mbega Ramadhani, Mohamed Elfakiri Ali, Open. J. Appli. Sci. **13**, 508 (2023).
- [3] V. Ivchenko, Eur. J. Phys. **39**, 045004 (2018).
- [4] J. L. Bradshaw, Am. J. Phys. **91**, 258 (2023).
- [5] Bernardo Reginald Christian, Perico Esguerra Jose, Day Vallejos Jazmine, Jerard Canda Jeff, Eur. J. Phys. **36**, 025016 (2015).
- [6] M. Turkyilmazoglu and T. Altundag, Eur. Phys. J. Plus **135**, 566 (2020).
- [7] Cory J. Naddy, Scott C. Dudley, and Ryan K. Haaland, Phys. Teach. **38**, 27 (2000).
- [8] J. Pantaleone, J. Messer, Am. J. Phys. **79**, 1202 (2011).
- [9] C. E. Mungan, T. C. Lipscombe, Phys. Teach. **60**, 327 (2022).
- [10] Alves, André Luíz, Bento Sérgio Souza, Marchi Carlos Henrique, Rev. Bras. Ensino Phys. **45**, e20230229 (2023).
- [11] D. Kleppner and R. Kolenkow, An Introduction to Mechanics (McGraw-Hill, 1973).
- [12] <https://www.youtube.com/watch?v=m308JKATo7g>.
- [13] R. M. Corless, G. H. Gonnet, D. E. G. Hare, D. J. Jeffrey, D. E. Knuth, Advances in Computational Mathematics **5**, 329 (1996).
- [14] R. Valluri, D. J. Jeffrey, and R. M. Corless, Can. J. Phys. **78**, 823 (2000).

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



DFT STUDY OF BaKN₃ AND BaRbN₃ PEROVSKITES: REVEALING THEIR MECHANICAL, OPTOELECTRONIC, AND MAGNETIC PROPERTIES

ESTUDIO DFT DE PEROVSKITAS BaKN₃ Y BaRbN₃: REVELANDO SUS PROPIEDADES MECÁNICAS, OPTOELECTRÓNICAS Y MAGNÉTICAS

SAADIYA BENATMANE^{a,b†}, SAMIRA HEZIL-ZIANE^a

a) Faculty of Sciences and Technology, Department of Science and Technology, BP227 Abdelhamid Ibn Badis University, 27000, Mostaganem, Algeria; saadia.benotmane@univ-mosta.dz[†]

b) Laboratory of Modelling and Simulation of Materials Science, Djillali Liabès University of Sidi Bel-Abbès, 22000, Sidi Bel-Abbes, Algeria.

† corresponding author

Recibido 7/4/2024; Aceptado 9/11/2024

The full-potential linearized augmented plane waves (FP-LAPW) method, which is based entirely on density functional theory (DFT), was used to investigate the structural, electronic, magnetic, optical, and elastic properties of BaXN₃ (X=K, Rb). This method also employs the Perdew-Burke-Ernzerhof generalized gradient approximation (GGA-PBE) and a modified Beck Johnson TB-mBJ potential in the exchange correlation term. When the resulting structural properties were examined, the findings showed that our compounds are more stable when they are configured as ferromagnetic materials. The total and partial density of state curves were used to assess the contributions of the various bands. Additionally, we discovered that the total magnetic moment is an integer of 6 μ_B , confirming the half-metallic nature. The mechanical stability of these compounds has been discovered. The elastic parameters are obtained, including the elastic constants, bulk modulus, anisotropy factor, Poisson's ratio, and Pugh's ratio.

El método de ondas planas aumentadas linealizadas de potencial total (FP-LAPW), que se basa completamente en la teoría funcional de la densidad (DFT), se utilizó para investigar las propiedades estructurales, electrónicas, magnéticas, ópticas y elásticas de BaXN₃ (X= K, Rb). Este método también emplea la aproximación de gradiente generalizado de Perdew-Burke-Ernzerhof (GGA-PBE) y un potencial TB-mBJ de Beck Johnson modificado en el término de correlación de intercambio. Cuando se examinaron las propiedades estructurales resultantes, los hallazgos mostraron que nuestros compuestos son más estables cuando están configurados como materiales ferromagnéticos. Se utilizaron curvas de densidad total y parcial de estados para evaluar las contribuciones de las distintas bandas. Además, descubrimos que el momento magnético total es un número entero de 6 μ_B , lo que confirma la naturaleza semimetálica. Se ha descubierto la estabilidad mecánica de estos compuestos. Se obtienen los parámetros elásticos, incluidas las constantes elásticas, el módulo de volumen, el factor de anisotropía, el índice de Poisson y el índice de Pugh.

PACS: Density-functional theory atomic and molecular physics (Teoría del funcional de densidad física atómica y molecular), structural properties of materials (propiedades estructurales de los materiales), Perovskites (Perovskitas); Mechanical, optoelectronic and magnetic properties (Propiedades mecánicas, optoelectrónicas y magnéticas)

I. INTRODUCTION

Globally, scientists are developing smart materials for a range of potential applications. Halfmetallic materials (HMs) are used to make spintronic devices [1]. The nature of HMs depends on the spin orientation, with one spin channel displaying semiconductor behavior while exhibiting metallic properties [2]. To put it simply, HM is a material in which a band gap is lacking for one kind of spin direction and present for the other kind of spin orientation. Any band gap in the case of a single spin orientation shows that the substance is completely spin-polarized at the Fermi level [3]. The spin-polarized current found in HM ferromagnetic materials may be used as a spin injector, gigantic magnetoresistance, and a building block for magnetic random-access memory [4–6].

Electric and spin current transports are determined by the characteristics of the band structure near the Fermi level in the solids concerned. For the spintronic applications, it would be interesting to examine the extent that the density

of states (DOS) near the Fermi level energy (E_F) of the systems considered are spin-polarized. This spin polarization (P^{DOS}) of the DOSs near the E_F is defined as:

$$P^{DOS} = \frac{N \uparrow (E_F) - N \downarrow (E_F)}{N \uparrow (E_F) + N \downarrow (E_F)} \quad (1)$$

Where are the spin-up and spin-down DOSs at the, respectively. This static spin polarization would then vary from -1.0 to 1.0 only. For the half-metallic materials, equals to either -1.0 or 1.0 . As mentioned above, the spin polarization defined by Eq. 1 is not necessarily the spin polarization of the transport currents measured in experiments. Indeed, the spin-polarizations measured by using different experimental techniques could differ significantly [7–10]. From the viewpoint of spintronic applications, only the current spin polarization instead of the P^{DOS} , counts.

First, de-Groot et al. reported HM in the Mn-based Heusler

alloys in 1983 [11]. Since the discovery of HM, theoretical research has been done on the half-metallic properties of other materials, including transition metal oxide and dilute magnetic semiconductors [12–16]. There have also been a few experimental experiments conducted [17, 18] Scientists have developed a new class of device that combines conventional microelectronics with spin-dependent phenomena like magnetic sensors and volatile magnetic random-access storage [19] due to the special spin up and spin down capabilities of HM.

The demand for novel nitrides is rising as chemists and material scientists broaden the range of accessible materials. [20, 21] The properties and functionality of materials is essential to sectors such as solar research, ultrasound, fuel cells, and many more are governed by the perovskite structure, which has the fundamental formula ABX_3 where A is a cation, B is a divalent metal ion, and X is a halogen anion (as shown in Figure 1) [22]. However, there are surprisingly few known nitrides with the perovskite structure. Recent computational studies have predicted the stability of rare earth transition metal nitride perovskites [23–26] as well as fascinating ferroic features such ferromagnetism in a variety of $REMn_3$ compounds and ferroelectricity in $LaWN_3$. RE stands for rare earth; M is for W or Re.

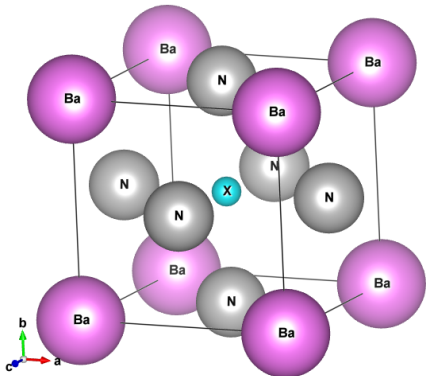


Figure 1. Perovskite crystal structure with $BaXN_3$ ($X=K$ and Rb).

The number of experimental reports is fairly small, and they typically lead to oxynitrides instead, but it has been demonstrated that they also have a number of intriguing characteristics, such as electrochemical activity and enormous magnetoresistance [27, 28]. On the other hand, several anti-perovskites (APs) containing nitrogen have drawn intensive interest because of their attractive physical properties [29].

The inability to synthesize oxygen-free phases in these systems is reflected in the scarcity of nitride perovskites. Further research into nitride perovskites has, however, been made possible by recent work from our team [30] producing thin film perovskite $LaWN_3$ and from Kloß et al. [31] synthesizing bulk perovskite $LaReN_3$. An oxygen-free, polar rhombohedral perovskite phase called $LaWN_3$ was produced in thin film form and showed a significant piezoelectric

response. The use of an activated nitrogen plasma raised the chemical potential of nitrogen, which has been proven to help to stabilize fully produced nitrides [30–37].

Despite a Goldschmidt tolerance factor of 0.99, which would typically indicate cubic symmetry, $LaReN_3$, which demonstrates metallic conductivity and Pauli paramagnetism, was synthesized using high pressure-high temperature techniques and crystallized in triclinic symmetry as a result of orbital ordering distortions [38]. These latest works offer inspiration and possible strategies for increasing the phase space of nitride perovskites [39, 40].

In the present work, the structural, elastic, electronic, magnetic and optical properties of the cubic perovskite $BaXN_3$ ($X=K, Rb$) are investigated through full potential linearized augmented plane wave method with in Wien2k code [43] To the best of our knowledge, this is the first literature report on the structural, magnetic, electronic, optical and elastic properties of $BaXN_3$ ($X=K, Rb$) materials.

II. CALCULATION DETAIL

Using density functional theory (DFT) [41, 42] as implemented in the full potential linearized augmented plane wave (FP-LAPW) method within the Wien2k package [43], the structural and electronic properties of $BaXN_3$ ($X=K, Rb$) compounds are investigated. The effects of exchange and correlation were parameterized according to the generalized gradient approximation (GGA-PBE) [44], Also, we have employed the modified Becke–Johnson (mBJ) [45] scheme for electronic properties' calculation.

Concerning the lattice constants of solids and atomization energies of molecules, the trends observed with the local density approximation (LDA) and the Perdew-Burke-Ernzerhof generalized gradient approximation (GGA-PBE) are the following: LDA clearly underestimates the lattice constants and overestimates the atomization energies. The Perdew-Burke-Ernzerhof generalized gradient approximation (GGA-PBE) which has been generally successful in systems where LDA is lacking and is often taken as a baseline functional for further case-specific corrections.

It's essential to note that local density approximation (LDA) and the Perdew-Burke-Ernzerhof generalized gradient approximation (GGA-PBE) tend to significantly underestimate the critical band separation in semiconductors and dielectrics. This limitation stems from their inherent structures, which inadequately account for exchange-correlation energy and its charge derivative. To deal with this issue of band gap underestimation, we adopted the modified Becke-Johnson potential (TB-mBJ), a choice commonly used in recent research. modified Becke-Johnson potential (TB-mBJ) approach is highly recommended for treating the band gap of semi-conducting materials.

The Perdew-Burke-Ernzerhof generalized gradient approximation (GGA-PBE) approximation is first used to get a view of the electronic structures and the

modified Becke-Johnson potential (mBJ-GGA-PBE) method is employed to get a better description of the energy band gaps.

We applied the TB-mBJ functional to account for exchange-correlation effects and improve the calculation of the electronic and optical properties of BaXN_3 . The TB-mBJ method has been shown to yield accurate band structures for various semiconductors and insulators, as well as to model half-metallic band structures for half-metallic materials [46-49]. One of the key features of the semi-local TB-mBJ exchange potential is the incorporation of a correction factor for the screening effect, improving upon the local approximation of the true potential. Its predictions of bandgaps for a range of materials are as accurate as those produced by the GW method or hybrid functionals. Moreover, compared to standard DFT methods, it is more cost-effective and computationally efficient. A common issue with standard LDA/GGA potentials is the error arising from electron self-interaction and Coulomb repulsion, which tends to underestimate the energy bandgap.

The selected cut-off parameter was $R_{MT}K_{max} = 9$, where R_{MT} is the small atomic radius in the unit cell and K_{max} refers to the size of the largest k vector in the plane wave expansion. In the full-potential scheme, the unit cell of the crystal is partitioned into two different regions: (MT) atomic spheres and (IR) interstitial region. The used energy separation between core and valence states is -6 Ry. The muffin-tin sphere radius (MTS) was equal to 1.97, 1.77, and 1.35 a.u for Ba, X = (K, Rb), and N, respectively. The wave function is extended into two different basic parts. In the atomic sphere, the wave function is extended in atomic-like functions (radial part times spherical harmonics). While in the interstitial region it is expanded in a plane wave basis. Inside the sphere $L_{max} = 10$.

Charge and energy convergence are ensured through a Fourier series expansion of charge density and potential within the interstitial region with a wave vector up to $G_{max} = 14$ (a.u.) $^{-1}$ [50].

The self-consistent field calculation iterations exhibit a convergence criterion of less than 10^{-4} Ry/atom. These adjustments contribute to refining the accuracy and reliability of our computational model, ensuring a comprehensive exploration of the system's electronic structure and properties [51].

A dense mesh of 3000 k-points and the tetrahedral method was utilized.

The mechanical properties are calculated by the analysis of tensor matrix through Chapin method [52] to find the coefficients of nonlinear first order differential equations. For cubic symmetry (C_{11} , C_{12} and C_{44}), they are enough to illustrate mechanical behavior of the studied materials. The optical properties are analyzed through Kramers-Kronig relation [53] between dielectric constants and all the necessary parameters, such as the dielectric function, extinction coefficient and refractive index, which are calculated from the dielectric constants.

III. RESULTS AND DISCUSSION

III.1. Structural properties

According to the literature, many perovskite materials exhibit a cubic structure at room temperature [54], characterized by the highest symmetry with the space group Pm-3m. In the case of the BaXN_3 (X=K, Rb) compounds studied, there are two types of atomic positions used to construct the unit cell. In the first scenario, the origin is defined by the cation (Ba or K/Rb), while in the second, the origin is determined by the other cation. Specifically, the K/Rb and Ba atoms are positioned at (0, 0, 0) and (1/2, 1/2, 1/2), respectively. The three nitrogen atoms are located at (1/2, 1/2, 0), (1/2, 0, 1/2), and (0, 1/2, 1/2). Figure 1 illustrates the unit cell of the cubic perovskite structure for the BaXN_3 (X = K, Rb) compounds.

In order to check the stable magnetic phase, the optimization of this compound was carried out within GGA in its ferromagnetic, non-magnetic, and anti-ferromagnetic configurations. Then, the structural parameters of the equilibrium were calculated by adjusting the total energy as a function of the volume, using Birch Murnaghan equation of state [55]. The total energy-volume of each configuration is shown in Figure 2. According to the obtained results, the ferromagnetic configuration has the lowest energy, which suggests that it is the most stable than the others. We evaluated the equilibrium parameters, the lattice parameter (a), the bulk modulus (B), the derivative of bulk modulus (B') and the total energy difference between the FM and AFM state ($\Delta E = E_{AFM} - E_{FM}$) of BaXN_3 (X=K, Rb) compounds, which are collected in Table 1. From the calculation, it is also found that the FM phase has lower energies than those of the AFM and NM phase, indicating the stability of FM phase ($\Delta E > 0$).

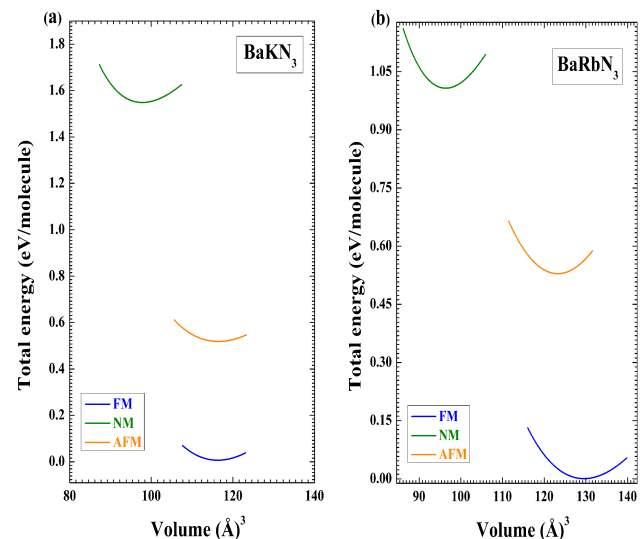


Figure 2. Variation in total energy per unit cell as a function of cell volume for ferromagnetic (FM), anti-ferromagnetic (AFM) and non-magnetic (NM) phases for (a) BaKN_3 and (b) BaRbN_3 perovskites, using the GGA-PBE approximation.

Formation energy E_f and cohesive energy E_c are two

important parameters which are used to determine the feasibility of experimental synthesis and required energy to break all bonds associated to the constituent atoms for the compound to decompose into free atoms, respectively. The more negative is E_f , the easier the synthesis. The more negative is E_c , the more stable the structure. To confirm the thermodynamic and chemical stability of the studied perovskite compounds, the cohesive energy E_c can be estimated by using the following formula [56]

$$E_c^{BaXN_3} = E_{tot}^{BaXN_3} - (E_{Ba} + E_X + 3E_N) \quad (2)$$

where $E_{tot}^{BaXN_3}$ is the equilibrium total energy of $BaXN_3$ ($X=K, Rb$) compounds, and E_{Ba} , E_X ($X=K, Rb$) and E_N are the total energies of the isolated atoms. To define the formation energy, we use the following equation [57]:

$$E_f^{BaXN_3} = E_{tot}^{BaXN_3} - (E_{Ba}^{bulk} + E_X^{bulk} + 3E_N^{bulk}) \quad (3)$$

Here, $E_{tot}^{BaXN_3}$ is the total energy of $BaXN_3$, E_{Ba}^{bulk} , E_X^{bulk} and $3E_N^{bulk}$ ($X=K, Rb$) are the total energies for each Ba , ($X=K, Rb$) and N atoms in their bulk states.

Furthermore, the Table 1 includes the energy of formation and cohesive energy for our compounds, offering valuable insights into their stability and bonding characteristics.

The energy of formation represents the energy change accompanying the formation of a compound from its constituent elements, providing information about the compound's thermodynamic stability. On the other hand, cohesive energy measures the energy required to separate the atoms within a compound into isolated atoms, reflecting the strength of chemical bonds and interatomic interactions. These parameters are essential for predicting material stability, chemical reactivity, and potential applications in various fields, including catalysis, materials science, and solid-state chemistry. The negative value of formation energy shows the thermodynamical stability of $BaXN_3$ ($X=K, Rb$).

III.2. Elastic properties

To investigate the elastic properties, we use IRelast package integrated in the WIEN2k. The study of the elastic properties informs on the behavior of this compound regarding ductility, brittleness and application of the external forces.

For cubic symmetry crystals, three independent elastic constants C_{11} , C_{12} and C_{44} are used to determine the mechanical properties, such as the rigidity and stability of the material under study. The calculated values of elastic constants C_{ij} are presented in Table 2. The bulk modulus B can be calculated from elastic constants using the relation

$$B = \frac{c_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (4)$$

All the elastic constants are positive and satisfy the criteria $C_{11} > 0$; $C_{44} > 0$; $(C_{11}-C_{12}) > 0$; $(C_{11}+2C_{44}) > 0$; $C_{12} < B < C_{11}$ for mechanical stability [58]. Table 2 presents the results of anisotropy factor A , Young's modulus E , Poisson's ratio ν and Pugh's index ratio B/G by using the following relations [59–66].

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} \quad (5)$$

$$E = \frac{9BG}{3G + B} \quad (6)$$

$$\nu = \frac{3B - 2G}{2(3B + G)} \quad (7)$$

$$G = \frac{G_R + G_V}{2} \quad (8)$$

$$G_R = \frac{5(C_{11} - C_{12})C_{44}}{4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})} \quad (9)$$

$$G_V = \frac{C_{11} - C_{12} + 3C_{44}}{5} \quad (10)$$

The classification of a material as a ductile or brittle can be made on the basis of the B/G ratio [67]. If this ratio is smaller than 1.75, the material shows brittle nature. Otherwise it shows ductile character. On the basis of Pugh's criteria [68] all the compounds show ductile nature. Ductility or brittleness of compounds can also be inferred from the poisson's ratio γ [69].

The material is ductile if the γ is greater than 0.26, otherwise it is brittle. The values listed in Table 2 confirmed that all compounds show ductile behavior. The elastic anisotropy factor A for all studied compounds is also presented in Table 2. For isotropic materials, this factor is equal to 1, and deviation of values from 1 represents a measure of the anisotropy possessed by the material. The values for $BaKN_3$ and $BaRbN_3$ are 1.07 and 0.15, respectively. These results clearly reveal that all compounds are anisotropic.

III.3. Electronic and magnetic properties

Figure 3 show how the spin-polarized band structures for $BaKN_3$ and $BaRbN_3$ compounds at the equilibrium lattice constant within Perdew-Burke-Ernzerhof generalized gradient approximation (GGA-PBE) and improved the modified Beck Johnson TB-mBJ approximations. These are drawn along the high symmetry k-path in the first Brillouin zone. We can see, for the spin-down states (Figure 3 (b, d)) of $BaKN_3$ and $BaRbN_3$ compounds, a metallic nature due to the intersecting of the valence band with Fermi level. In the other hand, for the spin-up channel (Figure 3 (a, c)), the compound shows an insulating character. In this channel (spin-up), we can see that $BaKN_3$ and $BaRbN_3$ compounds have an indirect band gap from Γ to M , the values of the band gap of $BaKN_3$ and $BaRbN_3$ are 2.79, 4.29 eV in GGA-PBE and 5.75, 6.27 eV in mBJ-GGA-PBE respectively which are very large. The half-metallic gap (HMGap) is deduced from the valence band maximum (VBM) which is nearer than the conduction band minimum (CBM) to Fermi level, for both approaches (GGA and TB-mBJ). The values of HM gap are

1.27, 2.74 eV for BaKN₃ and 3.17, 3.69 eV for BaRbN₃ in GGA-PBE and mBJ-GGA-PBE respectively. Therefore, we can see that the TB-mBJ method opens the band gap, located at Γ and M high symmetry points, for conduction band minimum (CBM) and valence band maximum (VBM), respectively. To explain the contribution of the various electronic states of band structures, it is also interesting to determine the total and partial densities of states, TDOS and PDOS, respectively.

As given in Figure 4, the TDOS and PDOS using GGA-PBE and mBJ-GGA-PBE are plotted for both majority (up) and minority (down) spin channels, respectively. Indeed, the density of states (DOS) reveals that p states of N atoms mainly contribute to the TDOS for the spin-up and -down channel states around the Fermi level. However, p states of K and Rb have a little contribution to the spin-down channel states. Moreover, p states of Ba have no contribution.

Figure 3, clearly shows that in the spin-down state, no band-gap is present, while in the spin-up state, a semiconducting bandgap appears. This indicates that the reported perovskite compounds exhibit half-metallic behavior. Our analysis of the electronic properties of BaKN₃ and BaRbN₃ suggests that these alloys could be promising candidates for spintronic applications, owing to their semiconducting nature in one spin channel.

The integer spin of magnetic moments plays a role in determining the nature of the electronic states in half metals, influencing their magnetic and electrical properties. It's worth noting that materials with half metallic property should possess integer spin magnetic moment or close to integral values. In addition, the spin magnetic moment depends on other factors such as crystal structure, electronic configuration, and interactions also play a role [70]. Our perovskites BaKN₃ and BaRbN₃ also possess integer spin magnetic moments which are presented in Table 3. From this table, we can understand that the perovskites BaKN₃ and BaRbN₃ have integer magnetic moments of 6 μ_B . Therefore, they exhibit HM behavior.

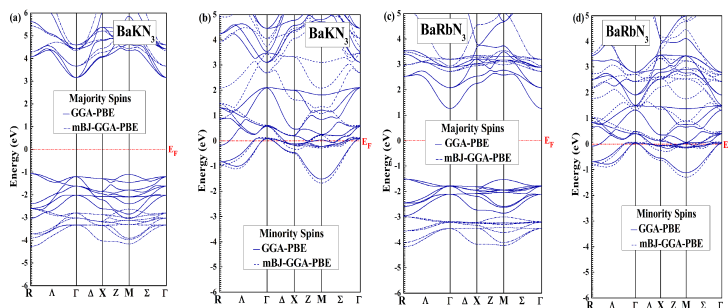


Figure 3. Comparison of GGA-PBE and mBJ-GGA-PBE spin-polarized band structures spin up, and spin down of BaKN₃ (a, b) and BaRbN₃ (c, d) calculated at the equilibrium lattice constant. The horizontal dashed line indicates the Fermi level

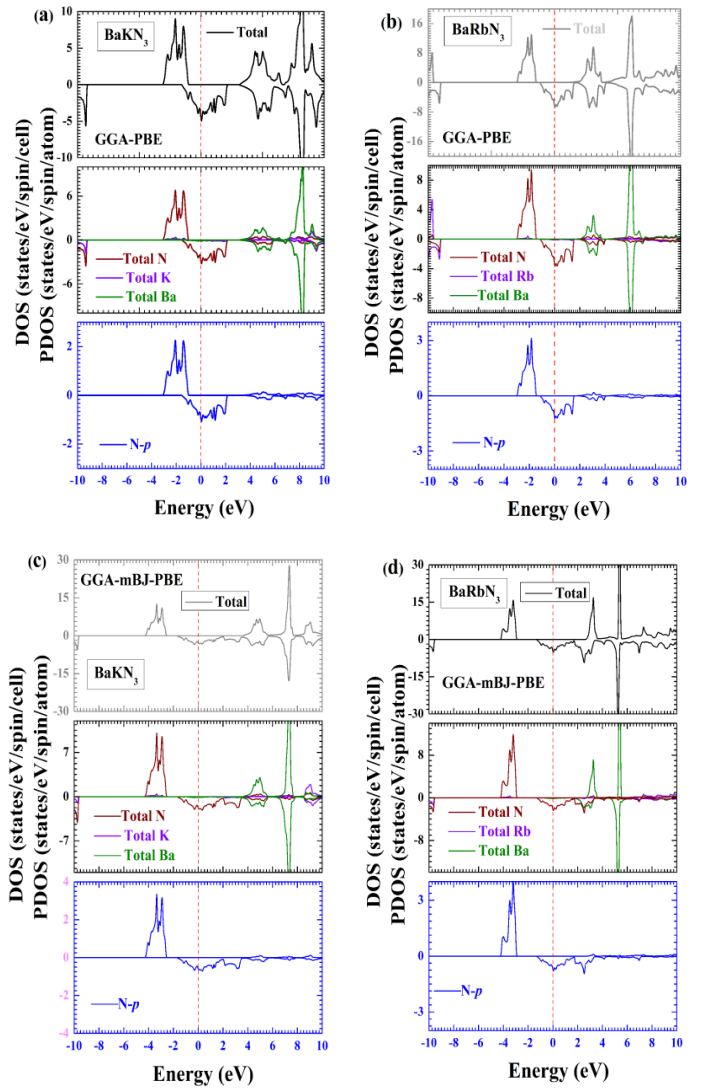


Figure 4. Spin-dependent total and partial densities of states for BaKN₃ (a,c) and BaRbN₃ (b, d) using GGA-PBE and mBJ-GGA-PBE. The vertical dashed line indicates the Fermi level. Positive and negative values of DOS hold for spin-up and spin-down states, respectively.

We remark that the interstitial and N magnetic moments are the highest, whereas that of K and Rb are the lowest. Despite TB-mBJ results show a slight increase in the magnetic moment of N atom.

III.4. Optical Properties

The theoretical equilibrium lattice constants are used to explore all optical characteristics. The optical properties of perovskite BaXN₃ (X=K, Rb) material were studied using the dielectric function $\epsilon(\omega)$ that describes the system response to an external electromagnetic field through the interaction of photons with electrons [71]:

III.4.1. Dielectric function (The real and imaginary part)

The real dielectric constant is a measure of the polarization of the material. The imaginary dielectric constant is a measure of the dielectric losses. The ratio of complex to real dielectric

constant is the loss of tangent of the dielectric material. The $\epsilon(w)$ is made up of two parts: the real and imaginary components, which are written as $\epsilon(w) = \epsilon_1(w) + i\epsilon_2(w)$ [72].

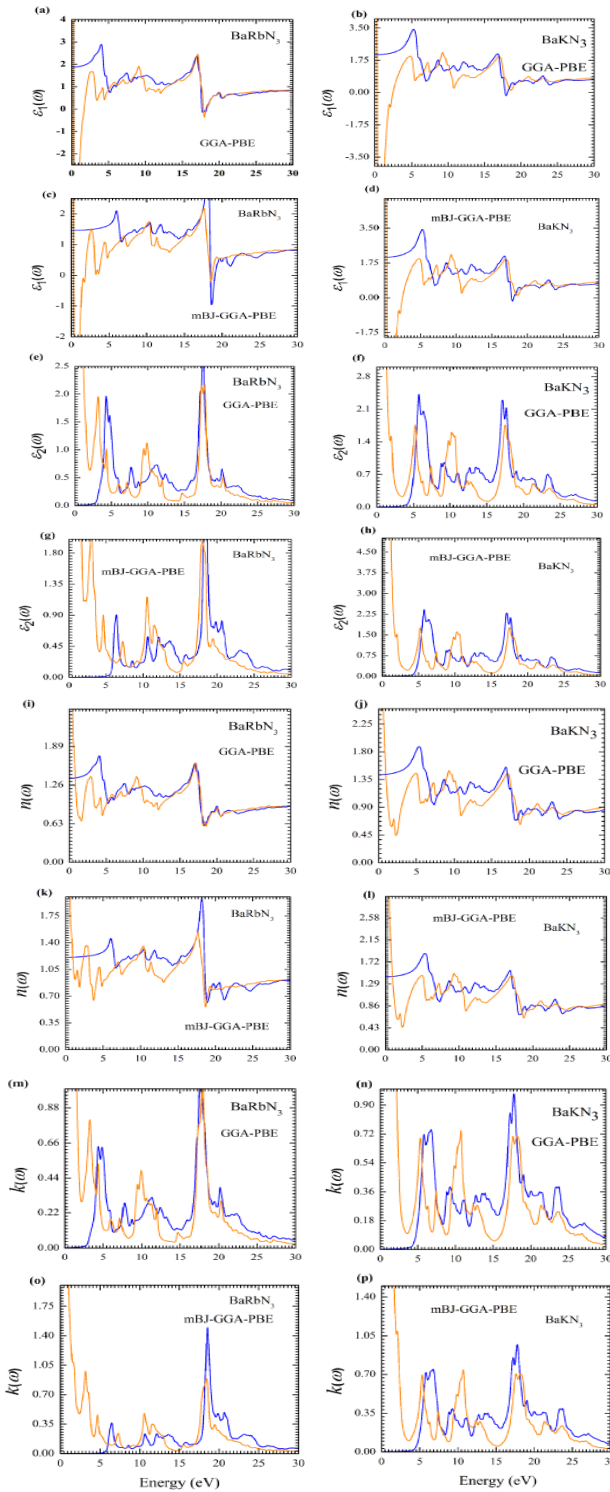


Figure 5. Calculated spin up (in blue) and down (in orange) of BaXN₃ (X=K, Rb), (a-d) real part of the dielectric function $\epsilon_1(w)$, (e-h) imaginary part of the dielectric function $\epsilon_2(w)$, (i-l) refractive index $n(w)$ and (m- p) extinction co-efficient $\kappa(w)$ as a function of photon energy for BaKN₃ and BaRbN₃ with GGA-PBE and mBJ-GGA-PBE, as indicated.

Figure 5 (a-d) show the computed $\epsilon_1(w)$ for both materials

using GGA-PBE and mBJ-GGA-PBE, while the imaginary part of the $\epsilon_2(w)$ (dielectric function) is shown in Figure 5 (e-h) within the input photon energy range of up to 30 eV, $\epsilon_1(w)$ characterizes photon dispersion within the material, whereas the imaginary part $\epsilon_2(w)$ is directly associated with the electronic band structure, representing the absorption of light in the crystal. For both materials, the estimated static dielectric function $\epsilon_1(0)$ is presented in Figure 5 (a-d), where $\epsilon_1(0) = 3.39, 3.44$ for BaKN₃ and $2.89, 2.07$ for BaRbN₃ in GGA-PBE and mBJ-GGA-PBE respectively, indicating that BaKN₃ dissipates more energy than BaRbN₃. According to the Penn model [73], materials with greater $\epsilon_1(0)$ (static dielectric functions) have smaller band gap energy, while those with lower values have larger band gap energy.

According to the calculations, these materials follow the Penn model. The Figure 5 (a-d) show that when photon energy is low, both materials waste more energy, and when photon energy is high, the behavior is the same.

$\epsilon_2(w)$ is shown in Figure 5 (e-h), which shows the polarizability of a material. Both materials have no polarization at 0 eV energy of an incident photon, as seen in the figures. It should be stated that for the interpretation of a structure (peak) in the optical spectra of the systems, it does not seem realistic to give a single transition assignment resembling the energy of the peak since numerous transitions between the occupied and the unoccupied energy bands for a particular structure can be satisfied [74]. The imaginary part shows that there exists an optical gap for the spin-up channel for our compounds, which supports our previous observation that the spin-up channel shows semiconducting character.

III.4.2. Refractive index $n(w)$ and the extinction coefficient $\kappa(w)$

Refractive index $n(w)$ is an important optical parameter to study the potential applications of a material in the field of optical and photonic devices [75]. The expression for refractive index is:

$$n(w) = \frac{((\epsilon_1^2(w) + \epsilon_2^2(w))^{1/2} + \epsilon_1(w))^{1/2}}{\sqrt{2}} \quad (11)$$

$$\kappa(w) = \frac{((\epsilon_1^2(w) + \epsilon_2^2(w))^{1/2} - \epsilon_1(w))^{1/2}}{\sqrt{2}} \quad (12)$$

where, n is the real part of the complex refractive index (refractive index) and κ is the imaginary part of the refractive index (extinction coefficient).

The spectra of refractive index $n(w)$ for BaKN₃ and BaRbN₃ are shown in Figure 5 (i-l). We can conclude from the plots that both curves are comparable with those of the real part of the dielectric function. The zero-frequency $n(0)$ refractive index is found 1.45, 1.43 for BaKN₃ and 1.37, 1.22 for BaRbN₃ in GGA-PBE and mBJ-GGA-PBE, respectively. Beyond the zero-frequency, the curve reached to peak value of 1.88 at 5.33 eV, 1.88 at 5.38 eV for BaKN₃ and 1.73 at 4.06 eV, 1.95 at 18.16

eV for BaRbN₃ in GGA-PBE and mBJ-GGA-PBE respectively. Since the value becomes greater than unity, this shows that photons slow down after interacting with the electron of a material. The $n(\omega)$ is a useful statistic property for estimating light refraction, particularly in photoelectric applications.

As photon energy increases, it is observed that the refractive index decreases towards zero and stabilizes at values close to zero. In contrast, a distinct peak in the refractive index is prominent in the infrared region. The high value of the refractive index indicates that, during light transmission, incident photons interact with more valence electrons, leading to high polarization and consequently a reduction in the speed of light [76–78]. In summary, the graphical representation underscores the dynamic behavior of refractive index and extinction coefficient with changing photon energy, elucidating the material's optical response and its impact on light transmission characteristics.

The extinction coefficient $\kappa(\omega)$, as shown in Figure 5 (m-p), closely follows the behavior of $\epsilon_2(\omega)$. The variation of $k(\omega)$ from $\epsilon_2(\omega)$ is attributed to small optical conductivity [79]. The extinction coefficient $k(\omega)$ may constitute an important criterion for the phenomenon of fluorescence; the higher the value of k , the higher the fluorescence [80].

For the extinction coefficient $k(\omega)$, the values reach maximum at about 17.75 and 18.54 eV and indicate strongest absorption at the edge and above 4.12 and 5.52 eV for BaKN₃ and BaRbN₃ respectively within mBJ-GGA-PBE. It is clear that the maximum value of $k(\omega)$ of BaRbN₃ is higher than that of the BaKN₃ compound, indicating that BaRbN₃ exhibits a much stronger ultraviolet absorption compared to that of the BaKN₃. On the other hand, the extinction coefficient $k(\omega)$ may constitute an important criterion for the phenomenon of fluorescence. Hence, according to this characteristic, BaRbN₃ should be more fluorescent in the ultraviolet range. At low frequency (energy) in the infrared–visible region, the extinction coefficient is zero for both compounds, indicating that BaXN₃ (X=K, Rb) are effectively transparent.

IV. SUMMARY AND CONCLUSION

The structural, electronic, magnetic, optical and elastic properties of nitride-based perovskites BaXN₃ (X = K, Rb) are studied using density functional theory (DFT). The structural study reveals that both compounds have stable and cubic structure. The calculated total energies show that the total energy difference $\Delta E = E_{AFM} - E_{FM}$ are positive, thus; the compounds BaXN₃ are structurally stable in the ferromagnetic state. The negative value of formation energy shows the thermodynamical stability of BaXN₃ (X=K, Rb). The GGA-PBE approximation is first used to get a view of the electronic structures and the mBJ-GGA-PBE potential methods are employed to get a better description of the energy band gaps. The magnetic moment of the of BaXN₃ compounds is 6 μ_B , which originates mainly from the N-p states.

Electronic properties were analyzed in two ways, i.e. by DOS and band structures with the GGA-PBE and mBJ-GGA-PBE, one can see that for BaXN₃ in both GGA-PBE and

mBJ-GGA-PBE there is an energy gap around the Fermi level in the majority-spin (spin-up) channel while the minority-spin (spin-down) channel is strongly metallic, that is to say, it exhibits a true HM characteristic with 100 % spin-polarization around the Fermi level.

The GGA-PBE approximation is first used to get a view of the electronic structures and the mBJ-GGA-PBE potential methods are employed to get a better description of the energy band gaps. The mechanical characteristics of BaXN₃ (X=K, Rb) compounds show that the compounds of interest are anisotropic, ductile, scratch-resistant, and elastically stable. The optical properties are investigated within the energy ranges of 0 eV-30 eV of incident photon energies. From the analyses, the main peak in the imaginary part of the spin-up channel corresponds to the transitions between the valence band (VB) and the conduction band (CB). Therefore, our compounds are identified as potential candidates for spintronic applications and high-performance electronic devices, which are of high technological importance due to their possible half-metallic character.

REFERENCES

- [1] I. Zutic, J. Fabian and S. D. Sarma, Rev. Mod. Phys. 76 (2004) 323
- [2] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, V. S. von Molnár., M. L. Roukes and D. M. Treger, Science. 294 (2001) 1488.
- [3] K. L. Wang, J. G. Alzate and P. Khalili Amiri, J. Phys. D: Appl. Phys. 46 (2013) 074003-074012.
- [4] H. Lee, F. Ebrahimi, P. K. Amiri and K. L. Wang, IEEE Magn. Lett. 7 (2016) 1.
- [5] W. Zhao, E. Belhaire, C. Chappert, P. Mazoyer, IEEE. Computer. Society. Annual. Symposium on VLSIIEEE. 40 (2008) 40.
- [6] K. Nikolaev, P. Kolbo, T. Pokhil, X. Peng, Y. Chen, T. Ambrose and O. Mryasov, Appl. Phys. Lett. 94 (2009) 222501.
- [7] R. J. Soulen Jr, J. M. Byers, M. S. Osofsky, B. Nadgorny, T. Ambrose, S. F. Cheng, P. R. Broussard, C. T. Tanaka, J. Nowak, J. S. Moodera, A. Barry and J. M. D. Coey, Science 282 (1998) 85.
- [8] J. M. De Teresa, A. Barthélémy, A. Fert, J. P. Contour, F. Montaigne and P. Seneor, Science 286 (1999) 507.
- [9] P. A. Dowben, N. Wu and C. Binek, J. Phys.:Condens. Matter 23 (2011)171001.
- [10] X. Kozina, J. Karel, S. Ouardi, S. Chadov, G. H. Fecher and C. Felser, G. Stryganyuk, B. Balke, T. Ishikawa, T. Uemura, M. Yamamoto, and E. Ikenaga, Phys. Rev. B 89 (2014) 125116.
- [11] S. Tsunegi, Y. Sakuraba, M. Oogane, K. Takashi and Y. Ando, Appl. Phys. Lett. 93 (2008) 112506.
- [12] T. Ishikawa, T. Marukame, H. Kijima, K. I. Matsuda, T. Uemura, M. Arita and M. Yamamoto, Appl. Phys. Lett. 89 (2006) 192505.
- [13] Y. Wang, J. Zheng*, Z. Ni, R. Fei, Q. Liu, R. Quhe, C. Xu, J. Zhou, J. Gao and J. Lu, Nano. 07 (2012) 1250037.

- [14] H. X. Liu, H.Y. Honda, T. Taira, K. I. Matsuda, M Arita, T. Uemura and M. Yamamoto, *Appl. Phys. Lett.* 101 (2012) 132418.
- [15] J. Y. T. Wei, N. C. Yeh, R. P. Vasquez and A. Gupta, *J. Appl. Phys.* 83 (1998) 7366.
- [16] M. Ram, A. Saxena, A. E. Aly and A. Shankar, *RSC Adv.* 10 (2020) 7661
- [17] J. H. Park, S. K. Kwon and B. I. Min, *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.* 65, (2002) 174401.
- [18] I. Galanakis and E. Şaioğlu, *Appl. Phys. Lett.* 99 (2011) 052509.
- [19] Z. Wang, Q. Jing, M. Zhang, X. Dong, S. Pan and Z. Yang, *RSC Adv.* 4 (2014) 54194.
- [20] W. Sun, C. J. Bartel, E. Arca, S. R. Bauers, B. Matthews, B. Orvañanos, B. R. Chen, M. F. Toney, L. T. Schelhas, W. Tumas, J. Tate, A. Zakutayev, S. Lany, A. M. Holder and G. Ceder, *Nat. Mater.* 18 (2019) 732.
- [21] A. Zakutayev, S. R. Bauers and S. Lany, *Chem. Mater.* 34 (2022) 1418.
- [22] N. Hasan, M. Arifuzzaman and A. Kabir, *RSC Adv.* 12 (2022) 7961.
- [23] S. F. Matar and G. Demazeau, *J. Solid State Chem.* 183 (2010) 994.
- [24] R. Sarmiento-Pérez, T. F. T. Cerqueira, S. Körbel, S. Botti and M. A. L. Marques, *Chem. Mater.* 27 (2015) 5957.
- [25] M. C. Jung, K. W. Lee and W. E. Pickett, *Phys. Rev. B.* 97 (2018) 121104.
- [26] V. A. Ha, H. Lee and F. Giustino, *Chem. Mater.* 34 (2022) 2107.
- [27] Y. W. Fang, C. A. J. Fisher, A. Kuwabara, X. W. Shen, T. Ogawa, H. Moriwake, R. Huang and C. G. Duan, *Phys. Rev. B.* 95 (2017) 014111.
- [28] J. A. Flores-Livas, R. Sarmiento-Pérez, S. Botti, S. Goedecker and M. A. L. Marques, *J. Phys. Mater.* 2 (2019) 025003.
- [29] Y. Wang, Q. Wang, Z. Liu, Z. Zhou, S. Li, J. Zhu, R. Zou, Y. Wang, J. Lin and Y. Zhao, *J. Power. Sources.* 293 (2015) 735.
- [30] P. Bacher, P. Antoine, R. Marchand, P. L'Haridon, Y. Laurent and G. Roullet, *J. Solid State Chem.* 77 (1988) 67.
- [31] N. E. Brese and F. DiSalvo, *J. Solid State Chem.* 120 (1995) 378.
- [32] S. J. Clarke, B. P. Guinot, C. W. Michie, M. J. Calmont and M.J. Rosseinsky, *Chem. Mater.* 14 (2002) 288.
- [33] M. Yang, J. Oró-Solé, A. Kusmartseva, A. Fuertes and J. P. Attfield, *J. Am. Chem. Soc.* 132 (2010) 4822.
- [34] A. Fuertes, *J. Mater. Chem.* 22 (2012) 3293.
- [35] A. P. Black, H. E. Johnston, J. Oró-Solé, B. Bozzo, C. Ritter and C. Frontera, *Chem. Commun.* 52 (2016) 4317.
- [36] K. R. Talley, J. Mangum, C. L. Perkins, R. Woods-Robinson, A. Mehta, B. Gorman, G. L. Brennecke and A. Zakutayev, *Adv. Electron. Mater.* 5 (2019) 1900214.
- [37] R. Niewa, *Eur. J. Inorg. Chem.* 2019 (2019) 3647.
- [38] K. R. Talley, C. L. Perkins, D. R. Diercks, G. L. Brennecke and A. Zakutayev, *Scienc.e* 374 (2021) 1488.
- [39] S. D. Klotz, M. L. Weidemann, J. P. Attfield and J. P. Angew. Chem., *Int. Ed.* 60 (2021) 22260.
- [40] V. N. Antonov, L. V. Bekenov and A. Ernst, *Phys. Rev. B.* 94 (2016) 035122
- [41] P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.* 136 (1964) B864
- [42] W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.* 140 (1965) A1133
- [43] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka and J. Luitz, WIEN2k, An Augmented Plane Wave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties (Vienna University of Technology, Austria, 2012).
- [44] J. P. Perdew, K. Burke and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* 77 (1996) 3865
- [45] F. Tran and P. Blaha, *Phys. Rev. Lett.* 102 (2009) 226401
- [46] D. Koller, F. Tran and P. Blaha, *Phys. Rev. B* 83 (2011) 195134.
- [47] J.P. Perdew, K. Burke and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* 77 (1996) 3865
- [48] D.J. Singh, *Phys. Rev. B* 82 (2010) 155145
- [49] S.D. Guo and B.G. Liu, *Europhys. Lett.* 93 (2011) 47006
- [50] Y. Rakita, S. R. Cohen, N. K. Kedem and G. Hodes, *MRS Commun.* 5 (2015) 623
- [51] F. Wooten, *Optical Properties of Solids.* Academic Press, New York (1972).
- [52] G. Grimvall, *Thermophysical Properties of Materials.* Amsterdam: Elsevier (1999).
- [53] R. Hill, *The Elastic Behaviour of a Crystalline Aggregate.* Proc. Phys. Soc. Sect. A. 65 (1952) 349
- [54] J. Bartolome, D. Gonzalez, R. Navarro, C. Ridou, M. Rousseau and A. Bulou, *J. Phys. C. Solid State Phys.* 20 (1987) 2819.
- [55] F.D. Murnaghan, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 30 (1944) 244
- [56] H. Benaissa, S. Benatmane, S. Amari, K. Obodo, L. Beldi, H. Bendaoud, and B. Bouhafs, *Spin* 8 (2018) 1850017.
- [57] S. Benatmane, H. Bendaoud, L. Beldi, B. Bouhafs, S. Mécabih, and B. Abbar, *J. Supercond. Nov. Magn.,* 31 (2018) 2767.
- [58] M. Born, *Proc. Camb. Phil. Soc.* 36 (1940) 160
- [59] W. Voigt, *Lehrbuch der Kristallphysik,* Taubner, Leipzig, 1928.
- [60] A. Reuss and Z. *Angew. Math. Mech.* 9 (1929) 49
- [61] R. Hill, *The elastic behaviour of a crystalline aggregate,* Proc. Phys. Soc. 65 (1952) 349
- [62] S.F. Pugh, *Philos. Mag.* A 45 (1954) 823.
- [63] R. Gaillac, P. Pullumbi and F.X. Coudert, *J. Phys. Condens. Matter.* 28 (2016) 275201.
- [64] V. Erofeev and I. Pavlov, *J. Appl. Mech. Tech. Phys.* 56 (2015) 1015.
- [65] F. Tanaka and H. Takahashi, *J. Chem. Phys.* 83 (1985) 6017.
- [66] Z. Wu, E. Zhao, H. Xiang, X. Hao, X. Liu and J. Meng, *Phys. Rev. B.* 76 (2007) 054115
- [67] F. Peng, L. Han, H. Fu and X. Cheng, *Phys. Status Solidi.* 246 (2009) 1590.
- [68] N. Korozlu, K. Colakoglu, E. Deligoz and S. Aydin, *J. Alloy. Comp.* 546 (2013) 157.
- [69] G. Chen and P. Zhang, *Defence. Tech.* 9 (2013) 131.
- [70] S. Benatmane and B. Bouhafs, *Comput. Condens. Matter,* 19 (2019) e00371

- [71] S. Benatmane and S. Cherid, JETP Letters, 111 (2020) 694–702.
- [72] S. Benatmane, M. Affane, Y. Bouali, B. Bouadjemi, S. Cherid, and W. Benstaali, Rev. Mex. Fis. 69 (2023) 011003
- [73] S. Benatmane, L. Beldi, H. Bendaoud, S. Méçabih, B. Abbar, and B. Bouhafs, Ind. J. Phys. 93 (2019) 627
- [74] G. Harbeke, In Optical properties of Solids: F. Abelès (Ed.), North-Holland, Amsterdam, 1972.
- [75] P. J. L. Hervé and L. K. J. Vandamme, Infrared Phys. Technol. 35 (1994) 609.
- [76] B. Bouadjemi, M. Houari, S. Benatmane, M. Matougui, S. Haid, S. Bentata, and B. Bouhafs, Comput. Condens. Matter. 26 (2021) e00531
- [77] M. Fox, Optical properties of solids. Oxford master series in condensed matter physics, ed: Oxford University Press, Oxford, (2001).
- [78] S. Benatmane, Emerg. Mater. 5 (2021) 1797
- [79] S. Azam, S. Goumri-Said, S. A. Khan and M B. Kanoun, J. Phys. Chem. Solid. 138 (2020) 109229
- [80] S.Z.A. Shah, S. Niaz, T. Nasir and J. Sifuna, Results. Chem. 5 (2023) 100828.

Table 1. Calculated equilibrium lattice parameter (a), bulk modulus (B), derivative of bulk modulus (B'), the cohesive energy E_c (eV), formation energy E_f (eV) and the energy difference $\Delta E = E_{AFM} - E_{FM}$ (eV) for the ferromagnetic (FM), anti-ferromagnetic (AFM) and non-magnetic (NM) states for the three types of $BaXN_3$ ($X=K, Rb$) perovskites by the GGA-PBE.

Compound	Method		a (Å)	B (GPa)	B'	E_c (Ry)	E_f (Ry)	ΔE (meV)
BaKN ₃	GGA-PBE	FM	4.88	28	3.50	-1.42	-0.28	
		AFM	4.77	25	4.89	-1.39	-0.25	
		NM	4.60	34	7.23	-1.31	-0.17	467.02
BaRbN ₃	GGA-PBE	FM	5.06	38	4.53	-1.36	-0.23	
		AFM	5.00	35	3.83	-1.32	-0.19	
		NM	4.58	36	5.50	-1.29	-0.16	593.45

Table 2. Calculated elastic constants C_{ij} (GPa), bulk modulus B (GPa), shear modulus G (GPa), Young's modulus E (GPa), Poisson's ratio ν , anisotropy factor A and Pugh's ratio B/G for the $BaXN_3$ ($X=K, Rb$) perovskites.

	C_{11}	C_{12}	C_{44}	B	GV	GR	G	B/G	A	E	ν
BaKN ₃	48.22	17.98	16.32	28.06	15.84	15.81	15.82	1.77	1.07	39.95	0.36
BaRbN ₃	95.01	10.33	6.76	38.56	20.99	10.19	15.59	2.47	0.15	41.22	0.32

Table 3. Calculated total, partial and interstitial magnetic moments, half-metallic gaps (HM) (eV) and energy gaps E_g (eV) of the the $BaXN_3$ ($X=K, Rb$) perovskites compounds by the GGA-PBE and mBJ-GGA-PBE.

	Methods	μ_{inters} (μ_B)	μ_{Ba} (μ_B)	μ_X ($X=K, Rb$) (μ_B)	μ_N (μ_B)	μ_{tot} (μ_B)	HM gap (eV)	E_g (eV)	Band gap type
BaKN ₃	GGA-PBE	0.51	-0.01	0.16	1.77	6.00	1.27	2.79	indirect (Γ -M)
	mBJ-GGA-PBE	-0.05	-0.04	0.12	1.99	6.00	2.74	5.75	
BaRbN ₃	GGA-PBE	1.07	-0.02	0.08	1.62	6.00	3.17	4.29	indirect (Γ -M)
	mBJ-GGA-PBE	0.28	-0.04	0.06	1.90	6.00	3.69	6.27	

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



FABRICATION, CHARACTERIZATION AND PERFORMANCE OF GRAPHENE OXIDE-BASED FILTRATION DEVICES

FABRICACIÓN, CARACTERIZACIÓN Y COMPORTAMIENTO DE DISPOSITIVOS DE FILTRACIÓN BASADOS EN GRAFENO

A. A. OLIVEIRA^a, J. A. G. CARRIO^{a,b†}

a) Mackenzie University, Sao Paulo, Brazil.

b) National University of Singapore, Singapore. juan.carrio@nus.edu.sg.[†]

[†] corresponding author

Recibido 18/10/2024; Aceptado 20/11/2024

Graphene oxide (GO) has been the subject of numerous studies due to the anomalous water transport through membranes of layered, laminated structures. The discovery of this phenomenon opened up the possibility of using GO in various applications related to nanofluids and nanofiltration and its potential integration in separation methods in industries. In the most accepted model, a few layers of water fill two-dimensional capillaries of an interconnected structure of GO sheets. Studies have shown that high pressures can induce slight chemical modifications in GO. Using high flow rates and thin membranes is economically preferable. In this work, filtration elements based on GO were fabricated under high pressure to primarily achieve these conditions. A nanostructured device was obtained, capable of filtering for over 29 hours with stability and efficacy in different aqueous solutions of organic dyes and clay particle suspensions up to the detection limit of UV-Vis spectroscopy. Additionally, it exhibited a rejection rate of 90 % to 100 % for trivalent and divalent cations in saline solutions. A comparative study on GO treated directly with a metal and a polymeric material under high pressures is presented. The presence of the metal at high pressures led to a partial reduction of the GO, which caused significant surface modification. Conversely, the presence of the polymer helped preserve functional groups both on the surface and in the inner layers of the devices, which resulted in a structure that allowed for a constant flow of saline solutions containing organic and inorganic contaminants.

El óxido de grafeno (GO) ha sido objeto de numerosos estudios debido al transporte anómalo de agua a través de membranas de estructuras laminadas en forma de capas. El descubrimiento de este fenómeno abrió la posibilidad de utilizar GO en diversas aplicaciones de nano-fluidos y nanofiltración, así como su potencial integración en métodos industriales de separación. En el modelo más aceptado, unas pocas capas de agua llenan capilares bidimensionales de una estructura interconectada de hojas de GO. Estudios han demostrado que altas presiones pueden inducir ligeras modificaciones químicas en el GO. Usar altas tasas de flujo y membranas delgadas es económicamente preferible. En este trabajo, se fabricaron filtros de GO usando alta presión para ese fin. Los dispositivos nano-estructurado, filtraron durante más de 29 horas con estabilidad y eficacia soluciones acuosas de colorantes orgánicos y suspensiones de partículas de arcilla hasta el límite de detección de la espectroscopía UV-Vis. La tasa de rechazo alcanzó del 90 % al 100 % para cationes trivalentes y divalentes en soluciones salinas. Este estudio compara el GO tratado a altas presiones en contacto directo con un metal y con un material polimérico. La presencia del metal condujo a una reducción parcial del GO, lo que causó una modificación significativa de la superficie. Por el contrario, la presencia del polímero ayudó a preservar los grupos funcionales tanto en la superficie como en las capas internas de los dispositivos, lo que resultó en una estructura que permitió un flujo constante de soluciones salinas conteniendo contaminantes orgánicos e inorgánicos.

PACS: Graphene oxide (óxido de grafeno); water filtration (filtración de agua); nanofluids (nanofluidos).

I. INTRODUCTION

The concerns about environmental conditions are reaching various social, political, and economic segments as the problem affects humanity. There is a global discussion about environmental management, nature preservation, water scarcity, and efforts to educate people about environmental conservation. Meanwhile, the availability of fresh and drinkable water on the planet continues to decrease. Brazil holds around 16 % of the planet's total freshwater reserves and has the largest river and underground aquifer. The country still has a higher water availability per cubic meter per person than most countries worldwide. Even so, water filtration and purification from wastewater are necessary in many regions across the country [1,2].

There is intense research on new processes and materials for

water purification and desalination due to the drawbacks of today's commercial methods of Reverse Osmosis (RO) and thermal desalination, mainly related to their large energy footprints. Graphene and its variants have become one of the materials with the most significant potential for the fabrication of membranes with salt rejection of around 99 % and water permeability of around 100 L/cm².day.MPa, which is two orders higher than commercial RO membranes. Devices based on GO are strong candidates for water desalination and wastewater purification applications due to their selective properties of water over other molecules [3,4]. On the other side, graphite, the natural precursor of the graphene materials family, is among the many abundant minerals available in Brazil and is widely used in the Brazilian industry [5,6].

Nanostructured GO membranes are composed of layers of oxidised graphene sheets stacked on each other, with

oxygen-containing functional groups separating them. A frictionless water flow is attributed to pristine graphene regions forming nanochannels due to the non-uniform distribution of the chemical groups [3]. These laminates have excellent properties that make them suitable for use in membranes, including water dispersibility, hydrophilicity, a negatively charged surface, and scalability in production. As a result, GO-based membranes have been extensively researched for potential applications in water purification, organic solvent filtration, gas separation, and desalination through membrane distillation, among other uses [7,8].

The fabrication process of laminate membranes still presents several challenges, especially at scales larger than the laboratory level. Today's most common method at research laboratories is still vacuum filtration [9–11]. However, variables such as vacuum pressure, filtration volume, solid-liquid ratio, and other method-specific parameters can significantly impact the outcomes. This variability makes it difficult to compare different batches of membranes and various studies, leading to inconsistent results. This work uses a different approach to fabricating GO filtration devices: common compaction by uniaxial pressure has been applied to conform GO powder into mechanically stable membranes. This treatment leads to a microstructure different from the ordered laminates widely described in the literature.

II. EXPERIMENTAL

II.1. Synthesis of graphene oxide

A modified Hummers method was used to synthesise graphene oxide [12,13]. Briefly, graphite powder obtained from industrial waste was set to oxidise by stirring in a mixture of concentrated sulfuric acid and phosphoric acid in the proportion 98%/2% w/w. Immediately, the mixture was kept at 0 °C to prevent rapid heat generation, and potassium permanganate was added under vigorous stirring for 0.5 hours. The reaction mixture was heated to 40 °C for 4 hours and then stirred at room temperature for 8 hours. Hydrogen peroxide and ice were added to remove the remaining unreacted potassium permanganate and manganese dioxide. The purification process of GO was performed by several cycles of centrifugation and dispersion in deionised water. Finally, ultrasonication was applied for exfoliation. The suspension was stable, and its Zeta potential of approximately -40 mV was measured using a Zetasizer Nano ZS device.

II.2. Sample characterisation

The UV-visible spectroscopy (UV-Vis) characterisation of the liquids was performed using an Agilent 8453 spectrophotometer. Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FTIR) spectra of the samples were taken with a Spectrum BX spectrophotometer from Perkin Elmer. The GO chemical composition was determined by CHNS Elemental Analysis. A low-energy Scanning Electron Microscopy (SEM) (5 kV) from HITACHI, model H3000, was employed to perform surface

analysis of non-conductive materials, and a high-energy SEM from JEOL, model JSM6510, was used for samples covered with conductive carbon layer. GO samples were also analysed using a Witec Alpha R300 confocal Raman microscope with a 532 nm laser line and a power of 5 mW, and the thickness measurements were performed in an AFM Bruker Dimension Icon. A milliohmeter Agilent HP 4338B was used to measure electrical resistance measurements of the compacted samples by the four-point probe or Kelvin method. X-ray powder diffraction (XRD) data were collected with a conventional Bragg-Brentano geometry diffractometer, model Rigaku MiniFlex II, using $\text{CuK}\alpha$ radiation, with a fixed monochromator and slits. The experimental conditions in step-scan mode were: 30 kV, 15 mA, $3^\circ \leq 2\theta \leq 120^\circ$, step $2\theta = 0.01^\circ$, and a counting time of 1 second.

III. RESULTS AND DISCUSSION

The applied process was designed to minimise costs as much as possible, so it was considered that the resulting product, although still containing impurities or not fully exfoliated, could be used for specific applications, such as industrial water filtration. Fig. 1 shows the final brown powder and some steps of the oxidation and exfoliation process applied to low-cost graphite.

III.1. Fabrication of filtration devices

Compressed pellets in the form of discs were made using 5 g of GO dry powder. The powder was subjected to a uniaxial pressure of 12 MPa for 20 minutes using stainless steel matrixes of 3.0 cm and 1.5 cm diameter at room temperature.

From ten samples, five were pressed in direct contact with the metallic matrix (hereafter named GOM), and five were encapsulated on the top and bottom by Teflon discs with the same diameter (hereafter named GON). The final shape of all samples is a disc with average dimensions of 3 cm and 1.5 cm in diameter and 3 mm in height.

Figure 2 shows two of the obtained discs; one pressed with direct contact with the stainless-steel matrix (GOM) (a) and the other pressed between two polymeric discs (GON) (b), one of which is the white disc shown on the top of the GO.

III.2. Electrical resistivity measurement

The electrical resistance was measured using a four-point probe in each compacted sample. Twenty values were collected for each sample, and the measurements were repeated on four different days, considering the high sensitivity of GO to the environment humidity. The equipment collects 32 values for each resistance measurement. The average electrical resistance of the GON discs was $R_{GON} = (2681 \pm 159) \Omega$, while the average for the GOM samples was $R_{GOM} = (1373 \pm 112) \Omega$, almost half of the electrical resistance of the samples pressed with the polymer. The main source of uncertainty is the fluctuations in environmental humidity,

so the standard deviations can be regarded as a measure of uncertainty. Since the electrical conductivity of GO can only increase if the functional groups decrease, this result indicates that direct contact with metal under high pressure causes a partial reduction process, leading to an increase in conductivity, at least on the sample surface. This result also agrees with descriptions in the literature, where GO can be considered both an insulator and a semiconductor, depending on its preparation and modifications [14].



Figure 1. From left to right, stirring graphite in acid solution, hydrogen peroxide adding, and the final brown GO powder.

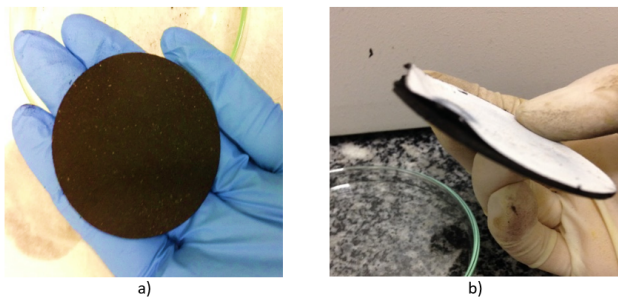


Figure 2. GO compacted discs a) pressed directly in the metallic matrix and b) encapsulated in Teflon.

III.3. Characterisation by Scanning Electron Microscopy (SEM)

The SEM images in Fig. 3 clearly show the difference between the surfaces of the samples. Fig. 3a) corresponds to the GOM sample, which is apparently well compact and has a smooth graphene-like surface. In contrast, Fig. 3b) shows the irregular surface of the GON sample, in which, despite being subjected to the same fabrication conditions, the GO sheets are not so well compacted. This leads us to hypothesise that the functional groups are preserved due to the presence of the polymer. Additionally, there is an increase in physical cross-linking caused by the interaction of GO functional groups under high pressure. As a result, the preservation of the functional groups leads to a rough, less graphene-like surface.

The semiquantitative EDS analysis of the precursor GO showed a mass proportion of carbon and oxygen of 57.69 % and 35.36 %, respectively.

III.4. CHNS Elemental Analysis

The synthesised GO contains 53.85% carbon, 3.27% hydrogen, 1.40% nitrogen, 1.14% sulfur, and 40.34% oxygen.

This result is compatible with the oxygen content detected by semiquantitative EDS.

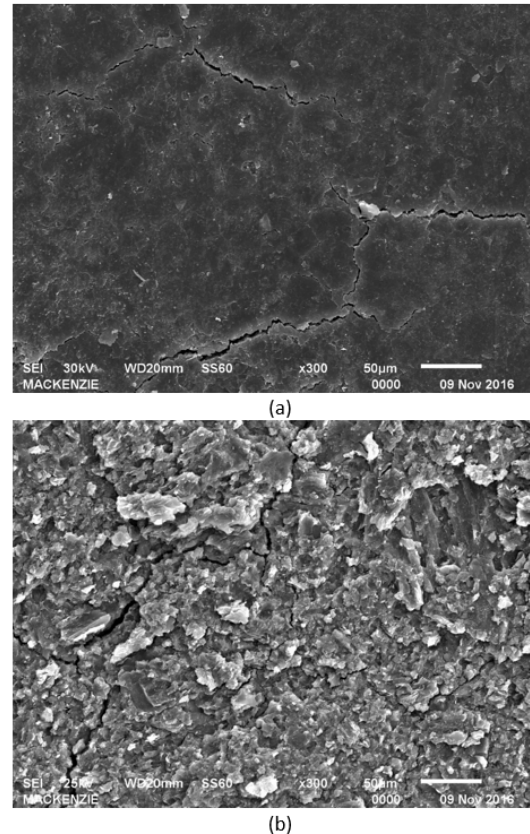


Figure 3. SEM images of the surfaces of a GOM sample in a) and a GON sample in b).

III.5. X rays powder diffraction analysis (XRD)

A comparison of the X-ray diffractograms of the compacted samples shows a difference in the position of the peak of the (002) planes, as shown in Fig. 4. The diffraction peak was fitted using a Pearson VII function, and the interplanar distance was determined by the Bragg equation. The sample encapsulated in polymer (GON) displays a distance between the layers that is clearly greater than that of the sample compacted in direct contact with the metallic matrix (GOM). Given that the diffractograms were collected under equal experimental conditions, this result may have two reasons: the polymer allows the functional groups of the GO to remain intact or contributes to the preservation of the presence of water between the GO layers, leading to a greater interplanar distance. Since the compaction process is conducted in just 20 minutes, it can be considered that this is not a sufficient period for water loss that could cause this effect. Therefore, we can conclude that in the case of the metallic matrix, the metal must reduce the functional groups. Additionally, the diffractograms show the presence of non-exfoliated material.

This characterisation by XRD is superficial in relation to the thickness of the compacted samples, given that the penetration depth of the X-rays is on the order of dozens of layers of GO. The full width at half maximum (FWHM)

of the peaks is similar for both samples, indicating that there is no different effect of the processes on the crystallinity of the samples. Thus, the greater distance between the layers of the polymer-encapsulated sample, at least in the region close to the surface, promotes the rapid entry of water to the internal layers without dismantling the device during the filtration process. Structurally, the polymer-encapsulated sample allows water entry due to the greater interplanar distance. Chemically, the penetration of water should dissolve the GO in this sample, but this does not occur due to the cross-linking between the functional groups of the inner layers within the volume of the sample.

III.6. Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FTIR)

Fig. 5a) presents the FTIR spectra of the compacted samples and the precursor GO. In the spectra of Fig. 5a), a high-intensity band appears at 3364.20 cm^{-1} , associated with the stretching mode between -OH and C-OH, caused by the presence of alcohol or water groups in the GO. The bands in the 1735 cm^{-1} region correspond to the stretching vibration bands of C=O in -COOH. The 1611 cm^{-1} bands are identified as the elongation of C=C unsaturation. A band at approximately 1400 cm^{-1} characterises the hydroxyl (-OH) on the surface of the graphene oxide structure. A band at approximately 1230 cm^{-1} characterises the bending modes in the C-O-C groups of the epoxy group. A band slightly above 1037 cm^{-1} characterises C-C, and a band just below 868.34 cm^{-1} corresponds to a C-O bond. These bands indicate that the oxidation of graphite occurred with the introduction of functional groups.

The modifications in the GO structure caused by the fabrication method of the filtration devices are visible through changes in the FTIR spectrum, as can be observed in Figures 5b) and 5c), which show the characteristics of the spectrum of the samples GOM and GON, respectively. In the GOM sample, there was a decrease in the high-intensity band at 3364.20 cm^{-1} , caused by the reduction of the water groups in the GO, resulting in a partial reduction of the GO. Additionally, we can observe an increase in various other bands, influencing the increase in physical cross-linking and resulting in higher resistance of the device when in contact with water.

III.7. AFM characterisation

The AFM characterisation allowed a description of the average morphology of the flakes, which exhibit wrinkles and curling, as illustrated in Fig 6. Consequently, determining the thickness of the material and estimating the number of layers of GO can only be done approximately. It is known that there is a space between the two-dimensional material and the substrate, often filled with water and air. Based on the profiles shown in Figure AFM, corresponding to the flakes in the same figure, it can be concluded that, on average, the analysed sample contains between 15 and 20 layers and has lateral dimensions of approximately $6\text{ }\mu\text{m}$.

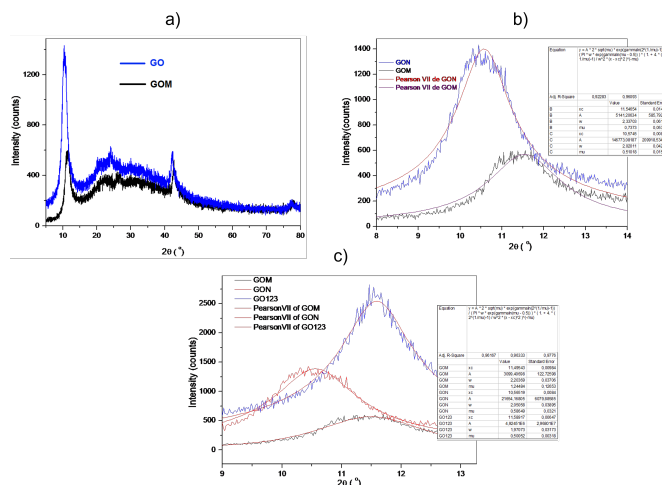


Figure 4. a) Diffractograms of the original GO powder (blue) and the sample fabricated in direct contact with the metallic matrix (black), b) Fitting of the diffraction peak corresponding to the (002) reflection of GO in the samples GON and GOM, and c) Comparison of the (002) reflection peaks of the original GO, GON and GOM.

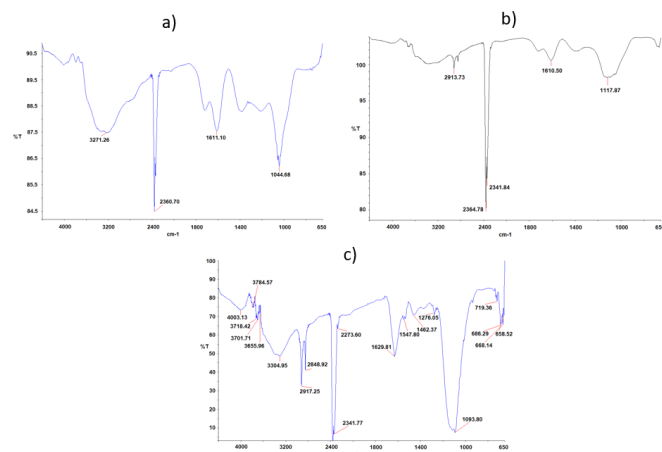


Figure 5. FTIR spectra of the a) precursor GO and the compacted samples, b) GOM, and c) GON.

III.8. Characterisation by Raman Spectroscopy

The Raman spectrum of GO consists of a broad band at approximately 1350 cm^{-1} , called the D band, which is commonly associated with defects in the graphitic structure related to sp^2 hybridisation (Fig. 7). The second band, known as the G band, is found near 1600 cm^{-1} , corresponding in the graphitic structure to the first-order scattering of the tangential stretching mode (E_{2g}). The 2D band around 2680 cm^{-1} is attributed to second-order processes, where double resonance transitions produce two phonons with opposite momentum. Unlike the D band, which is Raman active only in the presence of defects, the 2D peak is active even in the absence of defects. A defect-activated peak called D+G is also visible around 2950 cm^{-1} . The edge of GO generally has more defects than its basal plane due to a higher amount of sp^3 hybridisations. Its spectrum also shows a shift in the G band, corresponding to a disorder of the sp^2 bonds. The D band shows almost no shift, but there is an increase in

the full width at half maximum, suggesting the formation of functional groups due to extensive oxidation.

Sample	G_{app} position	D'_{inf} intensity
GON	1589.65	936
936GOM	1593.47	902

Furthermore, when GO is submitted to reduction, the position of the peak G_{app} shifts to higher values, and the intensity of D' decreases. Our results for the energy differences between the G_{app} and D'_{inf} peaks indicate a low oxygen content in both cases. However, the positions of G_{app} and intensities of D'_{inf} indicate a partial reduction of GOM when compared to GON. The average results for each type, as shown in Table ??, align with the tendency described in [15] when GO is reduced, and are consistent with our findings from SEM, FTIR, and UV-Vis.

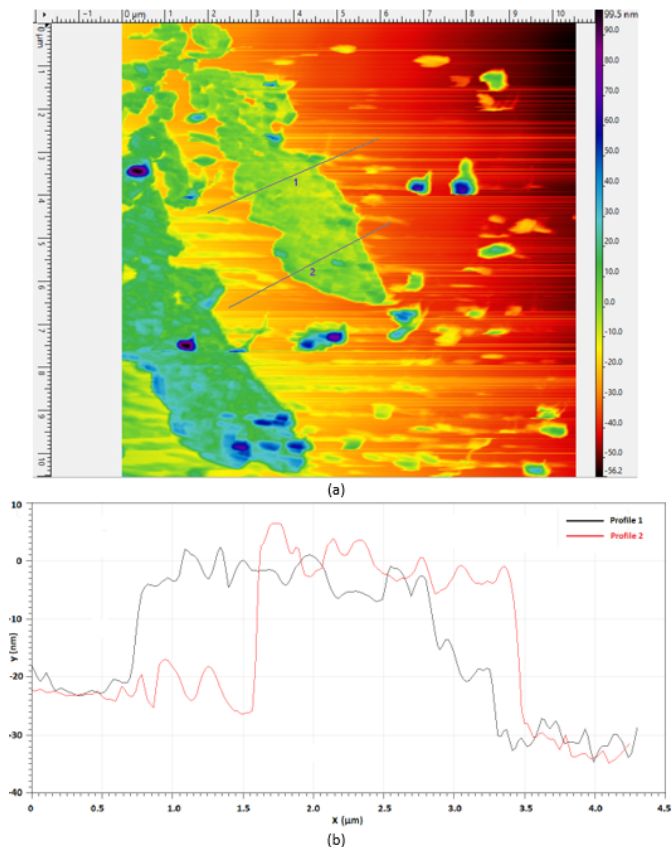


Figure 6. a) Average morphology and dimensions of GO flakes by AFM, and b) profile measurement of flake thickness.

The Raman spectra of three GON and three GOM samples, shown in Fig. 7, were analyzed using the metric proposed by [15], applying the Lorentz function for peak simulation. The peak at approximately $1,690 \text{ cm}^{-1}$ is now called G_{app} and interpreted as composed of two modes, G and D'_{inf} (D' inferred). The difference in their positions, $D'_{inf} - G_{app}$, is related to the mass ratio of carbon to oxygen content (C/O), which varies among graphene oxide (GO), reduced graphene oxide (rGO), and graphene. Expressions (1) to (3) provide the criteria for classification.

Graphene Oxide (GO):

$$D'_{inf} - G_{app} < 0; \quad C/O < 10 \quad (1)$$

Reduce graphene oxide (rGO):

$$0 < D'_{inf} - D_{app} < 25; \quad 10 < C/O < 500 \quad (2)$$

Graphene:

$$D'_{inf} - G_{app} > 25; \quad C/O > 500 \quad (3)$$

Table 1. Results from Raman spectra analysis

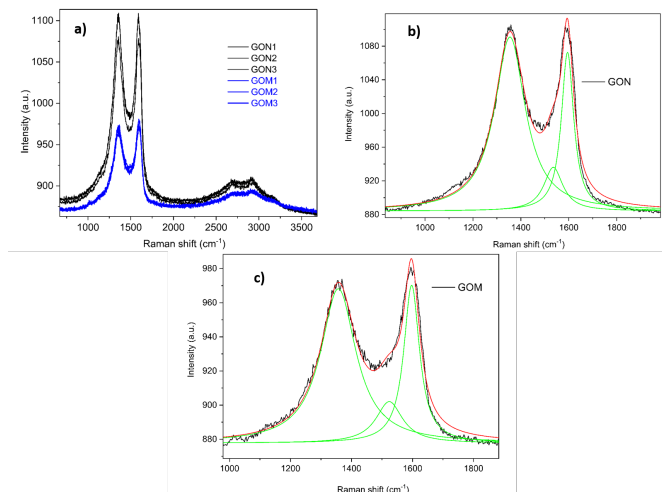


Figure 7. Raman spectra of a) 6 samples and two-peak fittings applied to the apparent peak G of b) GON and c) GOM.

III.9. Filtering experiments

The filtration experiments were carried out in a Büchner funnel without applying vacuum pressure. Samples of water containing organic dyes and clay particles, as well as others with a saline solution, were used to test the filtering discs. The GOM samples became mechanically unstable after a few minutes of contact with water, so they could not be used for water filtering. In contrast, all the GON discs were capable of continuing to filter the water solutions for at least 29 hours. The solutions filtered with the GON samples were characterised by UV-visible Spectroscopy (UV-Vis) and Inductively Coupled Plasma Emission Optical Spectroscopy (ICP-EOS).

Figure 8 presents the UV-Vis spectra of samples of the filtered solutions and a GO suspension in pure water for comparison. The UV-Vis spectrum of GO is shown in Fig. 8a. It exhibits a peak at around 233 nm, which is attributed to the $\pi - \pi^*$ transitions in the C=C bonds, and a shoulder near 290 to 300 nm, arising from the $n - \pi^*$ transitions in the C=O bonds [15,16]. Figure 8b shows the spectrum of the aqueous suspensions of clay particles and GO before and after filtration. The filtered sample shows a drop of approximately 50% in absorbance. The experiment involved filtering 0.3 L of a solution at atmospheric pressure containing 5.1 g/L of clay

particles and 8.3 g/L of GO for 29 hours, resulting in a flow rate of 56.2 L/m².h.

Figure 8c presents the spectra of the experiment with a saline solution before and after filtration. Two filtration processes were carried out at atmospheric pressure. Initially, 0.3 L of the aqueous solution was filtered, followed by another 0.3 L of the same solution. The solution was prepared with known concentrations of salts and a suspension of 8.3 g/L of GO. This experiment lasted approximately 21 hours and resulted in a total flow rate of 129.5 L/m².h. One important observation from this experiment is that as the device undergoes the filtration process, the flow of the solution during the first 10 to 15 minutes is low and gradually increases until a certain constant value, and the resulting liquids show a greater reduction in absorbance. To accelerate the process, an experiment was performed by applying a vacuum pressure of around 0.5 bar. This was only necessary for the first 5 minutes to stabilise the flux. The pressure treatment can increase the cross-linking between the GO flakes, which can explain the enhancement of the bulk mechanical strength.

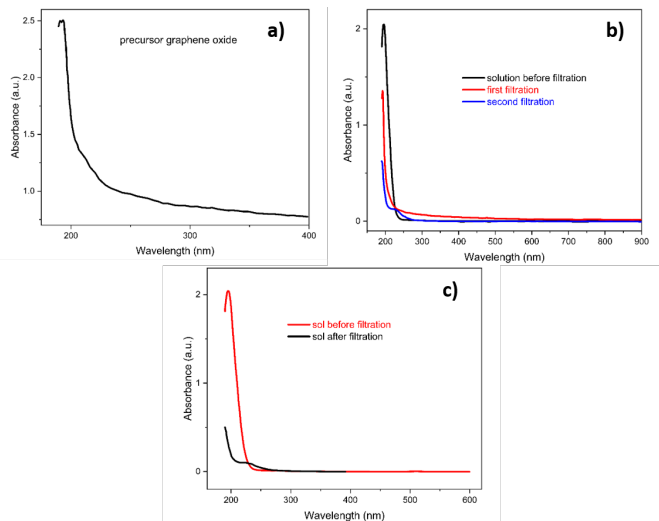


Figure 8. UV-Vis spectra of a) precursor GO suspension, b) and c) liquids before and after filtering experiments.

For salt filtration, solutions containing barium, chromium, sodium, and copper salts were used, all at a concentration of 100 ppm. An analysis using Inductively Coupled Plasma Emission Optical Spectroscopy (ICP-EOS) conducted to detect metal cations found that the filtering process resulted in the retention of Ba⁺² at approximately 90 %, Cr⁺³ at around 98 %, Na⁺ at about 12 %, and Cu⁺² at approximately 90 %.

IV. CONCLUSIONS

Using graphene oxide synthesised from low-cost graphite, nanostructured filtration devices were fabricated by a common compaction procedure of uniaxial pressure at room temperature. Graphene oxide pressed in direct contact with the metallic matrix suffered a partial reduction, which increased its electrical conductivity, caused a significant

surface modification, and made it unstable in the presence of water. Conversely, the compaction of GO powders previously encapsulated in a polymer resulted in nanostructured filters with high mechanical strength. The devices could filter for over 29 hours with a flow rate of 56.15 L/m².h different aqueous solutions of organic dyes and clay particle suspensions up to the detection limit of UV-Vis spectroscopy. Additionally, although not specifically designed for this purpose, they exhibited a rejection rate of Ba²⁺ at around 90 %, Cr³⁺ at around 98 %, Na⁺ at around 12 %, and Cu²⁺ at around 90 %, highlighting that these results were obtained using a precursor that is cheaper than others available on the market. We concluded that the presence of the polymer helped preserve the functional groups on the surface of the devices and, together with the bulk effect of high pressure, the procedure resulted in a crosslinked structure that allowed a constant flow of aqueous saline solutions containing organic and inorganic contaminants. Further investigation is necessary to understand the observed effects of the high pressure, both on the superficial and bulk microstructure of GO, under different conditions.

REFERENCIAS

- [1] BRASIL. Portaria n. 2914, de 12 de Dezembro de 2011, Diário Oficial Da União, Brasília, 12 Dez., (2011).
- [2] Agência Nacional de Água – Disponibilizada à Rede Das Águas, Revista Agua Online, Manual Do Rio Tietê, Instituto Vidagua, (2016).
- [3] S. Hong, C. Constans, M. V. Surmani Martins, Y. C. Seow, J. A. Guevara Carrió, S. Garaj, Nano Lett. **17**, 728 (2017).
- [4] R. R. Nair, H. A. Wu, P. N. Jayaram, I. V. Grigorieva, A. K. Geim, Science **335**, 442 (2012).
- [5] LIMA, D. B. de., Tese de Doutorado - Curso de Engenharia Elétrica, Escola Politécnica Da Universidade de São Paulo, (2011).
- [6] NASCIMENTO, Jefferson J. P.- Tese de Doutorado - Curso de Engenharia, Centro de Desenvolvimento Da Tecnologia Nuclear, Comissão Nacional de Energia Nuclear, Belo Horizonte (2013).
- [7] J. A. G. Carrió, Talluri, S. T. Toolahalli, S. G. Echeverrigaray, A. H. C. Neto, Sci. Rep. **13**, 9781 (2023).
- [8] D. Cohen-Tanugi, J. C. Grossman, Nano Lett. **12**, 7 (2012).
- [9] A. Pedico, L. Baudino, A. Aixalà-Perelló, Lamberti Membranes **13**, 429 (2023).
- [10] C. H. Tsou et al., J. Membr. Sci. **477**, 93 (2015).
- [11] J. A. G. Carrió, S. G. Echeverrigaray, V. P. Talluri, D. P. Sudhakaran, H. T. Gan, D. Gardenö, K. Friess, A. H. C. Neto, Int. J. of Hydrogen Energy **90**, 646 (2024).
- [12] D. Bouša et al., Chem. Eur. J. **23**, 11416 (2017).
- [13] D. C. Marcano et al. ACS Nano **4**, 4806 (2010).
- [14] X. Huang, et al., Nanotechnology **23**, 455705 (2012).
- [15] Q. Lai, S. Zhu, X. Luo, M. Zou, S. Huang, AIP Adv. **2**, 032146 (2012).
- [16] T. Zhang et al. Microchim. Acta **186**, 207 (2019).

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



A FINITE ELEMENT METHOD EXPLORATION OF TECHNOLOGICALLY RELEVANT GEOMETRIES IN PIEZOELECTRIC ENERGY-HARVESTING PZT-4

EXPLORACIÓN POR ELEMENTOS FINITOS DE GEOMETRÍAS TECNOLÓGICAMENTE RELEVANTES PARA LA RECOLECCIÓN DE ENERGÍA PIEZOELÉCTRICA EN PZT-4

H. MARTÍNEZ-DÍAZ^a, A. PELÁIZ-BARRANCO^{a,b,t}, Y. TONGQING^b

a) Grupo de Materiales Ferrosos, Facultad de Física, Universidad de La Habana. San Lázaro y L, Vedado, La Habana 10400, Cuba. [†]

b) Functional Materials Research Laboratory, College for Materials Science and Engineering, Tongji University, 4800 Caoan, Shanghai 201804, China.

[†] corresponding author

Recibido 14/10/2024; Aceptado 29/11/2024

In a piezoelectric material, any external action that can generate a mechanical deformation could be a potential source of electrical energy. This phenomenon is studied for the development of microscale devices, using as external agents the hydraulic pressure of a fluid, the movement of human beings and others. Nowadays, the main research efforts focus on optimizing the properties of developed piezoelectric materials and also to the simulation of different situations that allow the optimization of the energy harvesting devices. The present paper shows some simulations, which have been made by using the finite element method to simulate the energy harvesting; the results are presented for a commercial piezoelectric, PZT-4.

En un material piezoeléctrico cualquier acción externa que pueda generar una deformación mecánica puede ser una potencial fuente de energía eléctrica. Este fenómeno se estudia para el desarrollo de dispositivos en la microescala, utilizando como agentes externos, entre otros, la presión hidráulica de un fluido o el propio movimiento del ser humano. Las investigaciones actualmente están dirigidas, por una parte a la optimización de las propiedades de los materiales que se desarrollan para tales fines, y por otro lado, a la simulación en diferentes escenarios que permitan optimizar los dispositivos a desarrollar. En este trabajo presentamos algunas simulaciones, empleando el método de elementos finitos, para la recolección de energía piezoeléctrica; se presentan los resultados para un piezoeléctrico comercial, PZT-4.

PACS: Piezoelectricity (piezoelectricidad), 77.65.-j; piezoelectric materials (materiales piezoeléctricos), 77.84.-s; energy conversion (conversion de energía), 84.60.-h.

I. INTRODUCTION

Energy harvesting is the transformation of any form of energy from the medium into electrical energy for powering autonomous devices or circuits. Harvesters produce an amount of energy compared to industrial-scale generators that use coal, oil, nuclear power or other sources. The difference is that the energy source of collectors are residual, i.e. gradients of temperature of a combustion engine, electromagnetic energy in urban centers by radios, telephones and televisions, movement of sea waves or deformations in a piezoelectric material [1,2].

The main application of these collectors is found in microelectronic devices. The remote location of facilities that depend on the electricity grid makes it necessary to alternative energy source and although these methods do not produce much energy could be used to extend the life of batteries or other means that are to supply them [3,4].

Piezoelectric energy harvesting has become a growing area of interest due to its ability to generate electricity from movements and everyday mechanical vibrations, such as walking and the passage of vehicles. Unlike other forms of energy harvesting, such as solar or wind, piezoelectric devices are not condition-dependent and can be implemented in a variety of urban environments, from pavements to

the structure of buildings. This versatility allows easier integration into existing infrastructures, maximizing energy efficiency without requiring major modifications. In addition, their compact size and low maintenance cost make them ideal for applications in areas where access to sources of conventional energy is limited [2,5].

The phenomenon of piezoelectricity is the result of the mechanical-electric coupling existing in some dielectrics and can be direct or inverse. The application of mechanical stress on the material providing a bias is known as direct piezoelectric effect; a mechanical deformation of the material by applying an external electric field corresponds to the inverse piezoelectric effect [6,7].

Lead-based piezoelectric compounds, such as $\text{Pb}(\text{Zr,Ti})\text{O}_3$ and PbTiO_3 , and others based on them, have attracted most of the attention of the scientific community for several decades due to their excellent piezoelectric properties; special attention have also received lead-free piezoelectric materials [6-14].

Nowadays, the main researches on piezoelectric harvesting are directed to the optimization of the piezoelectric properties of the developed materials and also to the simulation of different situations that allow the optimization of the energy harvesting devices [15-18].

In this context, the present paper shows some simulations,

which have been made by using analytical methods and the finite element method to simulate the energy harvesting in piezoelectric materials in specific geometries relevant to applications and our experimental setup. A standard simulation package was used (COMSOL, 6.2 version).

II. FINITE ELEMENT METHOD

The finite element method (FEM), developed by the mathematician Richard Courant is today a common calculation procedure in structural mechanics and solid mechanics in general. Its use is also widespread in problems solving heat transfer, fluid mechanics and electromagnetism [19].

From a mathematical point of view, the FEM can be understood as a procedure to numerically solve problems posed by partial differential equations (PDEs), similar to other procedures, such as the Finites Differences Method (FDM) [20]. Considering the difficulty of solving analytically the majority of partial differential equations describing physical phenomena, except in very simplified cases or some in which the PDEs are not extremely complicated, the need arises to resort to these methods.

Most piezoelectric energy collectors which use a cantilever beam, as a structure on which the piezoelectric material is mounted, have been modeled by the use of analytic approaches. However, as more structurally complex devices are developed, these analytical models lack precision due to the simplifications introduced. In this context, the FEM has been very useful; its approach allows for the resolution of difficulties such as the complexity of the structure and employ theories of higher order (non-linear) [20].

III. SIMULATIONS

The most common geometries used in developing devices with piezoelectric materials, such as disks and plates, will be analyzed. The simulations will be carried out considering a commercial piezoelectric, PZT-4 [21].

III.1. Piezoelectric cylinder

Consider a commercial piezoelectric PZT-4 disk [21] with a diameter of 8 mm, to which a force (F) of -10 N is applied in the thickness direction (z axis). It has been also considered that the disk is fixed at the lower base, the lateral area is free and the upper face is subjected to the applied force F.

Two different thicknesses (z), 2 and 5 mm, have been considered. These dimensions have been selected considering common dimensions in the development of these materials. The analytical method and the finite element method have been used for simulations. Table 1 shows the corresponding elastic and piezoelectric parameters for the simulations.

For the analytical method, by using the equations of piezoelectricity [7], the output voltage (V) in the thickness direction (z axis), can be obtained:

$$V = -\frac{d_{33}F}{\epsilon_{33}A}z \quad (1)$$

where d_{33} is the piezoelectric coefficient, ϵ_{33} is the dielectric permittivity and A the area of the parallel surfaces.

Table 1. Elastic and piezoelectric parameters for the commercial piezoelectric PZT-4 [21]

Parameter	Value
s_{11}	$12.3 \times 10^{-12} \text{ Pa}^{-1}$
s_{12}	$4.05 \times 10^{-12} \text{ Pa}^{-1}$
s_{13}	$5.31 \times 10^{-12} \text{ Pa}^{-1}$
s_{33}	$15.5 \times 10^{-12} \text{ Pa}^{-1}$
s_{44}	$39 \times 10^{-12} \text{ Pa}^{-1}$
s_{66}	$32.8 \times 10^{-12} \text{ Pa}^{-1}$
ϵ_{r11}	1475
ϵ_{r33}	1300
d_{31}	$1.23 \times 10^{-10} \text{ m/V}$
d_{15}	$4.96 \times 10^{-10} \text{ m/V}$
d_{33}	$2.89 \times 10^{-10} \text{ m/V}$

Figure 1 shows the thickness dependence of the output voltage considering $z = 2 \text{ mm}$. Figure 1 shows the same dependence considering $z = 5 \text{ mm}$.

It can be observed that the output voltage shows an important dependence with the thickness of the piezoelectric sample. Also, the disagreement between the applied models increases for the finest sample.

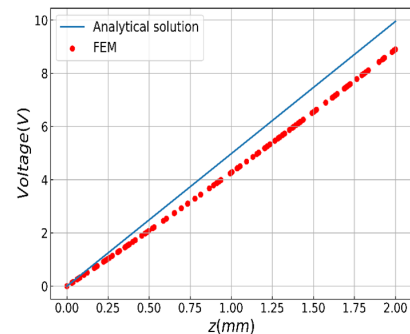


Figure 1. Thickness dependence (until 2 mm) of the output voltage for PZT-4, obtained by analytical method and FEM.

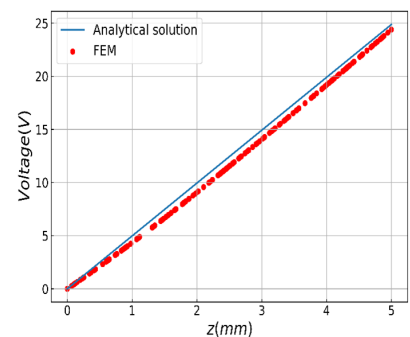


Figure 2. Thickness dependence (until 5 mm) of the output voltage for PZT-4, obtained by analytical method and FEM.

III.2. Piezoelectric cantilever plate

One of the studied applications considering piezoelectric materials is the collection of wave energy through the mounting of cantilevered plates in floating boxes on the sea [21].

In a previous research [21], simulations were performed using an analytical method and the FEM considering a cantilever plate, whose dimensions are shown in Fig. 3, which was composed of an aluminum sheet and another PZT-4 sheet, both 0.5 mm thick. Both sheets have the length (a) and width (b) shown in the figure.

It has been considered that the face at the origin of the coordinates is fixed (the plate is fixed at one end), while the upper face is considered subject to a pressure of 10000 N/m² in the thickness direction (z axis); the rest of the faces are considered free.

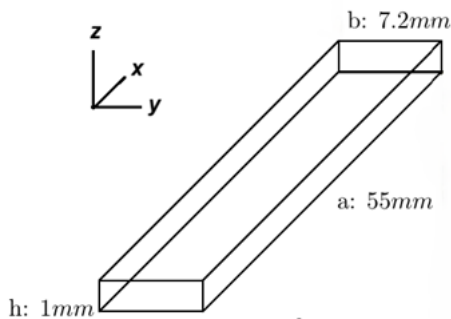


Figure 3. Dimensions of a piezoelectric cantilever for simulation [21].

The simulations have showed maximum values for the output voltage around 360 – 400 V [21].

What will be the result if the plate is considered only composed by the piezoelectric materials PZT-4 with the dimensions shown in Fig. 3?

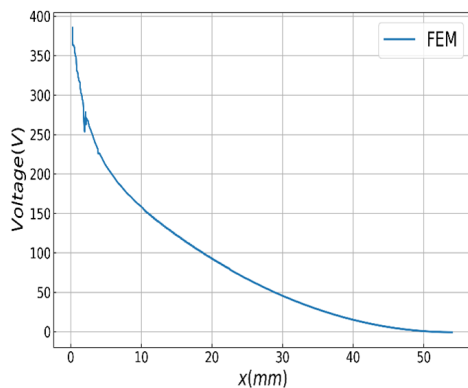


Figure 4. Output voltage vs x (length) for a PZT-4 cantilever plate, obtained by FEM.

Considering the origin at the fixed end of the plate, Fig. 4 and 5 show the dependence of the output voltage on the length of the

plate (keeping the other dimensions fixed) and its thickness (keeping the other dimensions fixed), respectively, showing different dependencies for both directions. Figure 6 shows a better view for both dependences, considering output electric field.

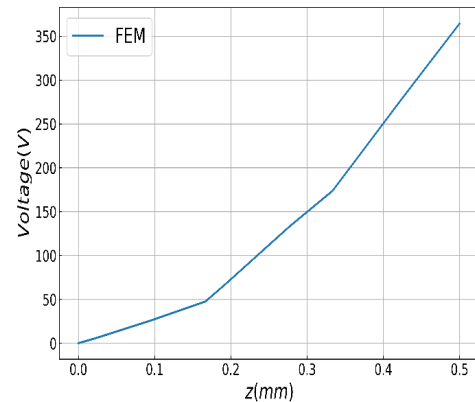


Figure 5. Output voltage vs z (thickness) for a PZT-4 cantilever plate, obtained by FEM.

Considering the thickness direction an out voltage of 364 V has been obtained for $z=0.5$ mm, which is in the same order than that of the previous report considering a composite of aluminum and PZT-4 [21]. From the technological point of view, it could suggest that cantilever plates developed from composites could offer better results that by using only piezoelectric plates.

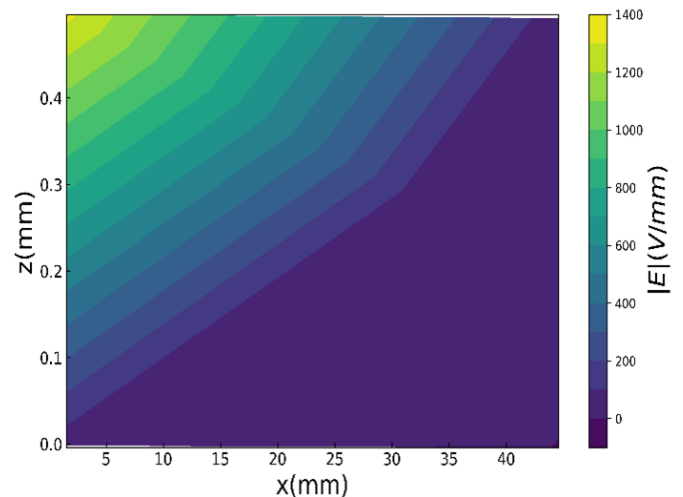


Figure 6. Output electric field as a function of x and z dimensions for a PZT-4 cantilever plate, obtained by FEM.

IV. CONCLUSIONS

Simulations by using the finite element method have been presented for disk and plate geometries in a commercial piezoelectric material, PZT-4. The results for a piezoelectric disk have shown an important dependence of the output voltage on the thickness. The piezoelectric cantilever plate showed similar results of the output voltage considering only

a PZT-4 plate respect to aluminum/piezoelectric composite plates.

V. ACKNOWLEDGEMENT

This work was supported by the National Key R&D Program of China (No. 2023YFE0198300). Thanks to the National Program for Basic Sciences of Cuba (Project No. PN223LH010-068). Dr. Peláiz-Barranco would like to thank to Tongji University from Shanghai, China.

REFERENCES

- [1] H. S. Kim, J.-H. Kim and J. Kim, *Int. J. of Precis. Eng. Manuf.* **12**, 1129 (2011).
- [2] Ch. R. Bowen, V. Yu, T. Hyunsun and A. Kim, *Modern Piezoelectric Energy-Harvesting Materials* (Springer International Publishing Switzerland, 2016).
- [3] C.R. Bowen, H.A. Kim, P.M. Weaver and S. Dunn, *Ener. Environ. Sci.* **7**, 25 (2014)
- [4] W. Tian, Z. Ling, W. Yu ID and J. Shi, *Appl. Sci.* **8**, 645 (2018).
- [5] Sh. Priya, H.-Ch. Song, Y. Zhou, R. Varghese, A. Chopra, S.-G. Kim, I. Kanno, L. Wu, D. S. Ha, J. Ryu and R. G. Polcawich, *Ener. Harvest. Syst.* **4**, 3 (2017).
- [6] P. V. Pavplov, *Física del Estado Sólido* (Mir. Moscú, 1987).
- [7] ANSI/IEEE Standard on Piezoelectricity, *IEEE Transactions on ultrasonic ferroelectrics and frequency control* **43**, 28 (1996).
- [8] P. Kumari, M. Lal, Sh. Prakash Rai and R. Rai, *Smart Materials for Smart Living, Chapter 7: Piezoelectric electroceramic perovskites and their applications* (Nova Science Publisher Inc., 2017).
- [9] G. H. Haertling, *J. Amer. Ceram. Soc.* **82**, 797 (1999).
- [10] J. Ou-Yang, Z. Benpeng, Y. Zhang, S. Chen, X. Yang and W. Wei, *Appl. Phys. A* **118**, 1177 (2015).
- [11] S. Trolier-McKinstry, Sh. Zhang, A. J. Bell and X. Tan, *Ann. Rev. Mater. Res.* **48**, 191 (2018).
- [12] M. Chandrasekhar, Y. Govinda Reddy and P. Kumar, *J. Elect. Mater.* **49**, 7238 (2020).
- [13] Y. Zhang, M. Xie, J. Roscow, Y. Bao, K. Zhou, D. Zhang and Ch. R. Bowen, *J. Mater. Chem. A* **5**, 6569 (2017).
- [14] H. J. Lee, Sh. Zhang, Y. Bar-Cohen and S. Sherrit, *Sensors* **14**, 14526 (2014).
- [15] C. Martinelli, A. Coraddu and A. Cammarano, *Int. J. Mech. Mater. Des.* **19**, 121 (2023).
- [16] C. Du, P. Liu, H. Yang, G. Jiang, L. Wang and M. Oeser, *Materials* **14**, 1405 (2021).
- [17] A. Kumar, R. Kumar, S. Chandra Jain and R. Vaish, *RSC Advances* **9**, 3918 (2019).
- [18] Y. Song, *J. Ener. Engin.* **145**, 04018076 (2019).
- [19] F. Beltrán, *Teoría General del Método de los Elementos Finitos*, Universidad Politécnica de Madrid, 2014.
- [20] J. M. Ramírez, *Desarrollo de dispositivos recolectores de energía de fuentes vibratorias*, Tesis de Doctorado en Ingeniería, Universidad Nacional del Sur, Argentina, 2019.
- [21] F. S. Pascual, *Análisis por elementos finitos de piezoeléctricos para la recolección de energía undimotriz*, Trabajo Final de Grado, Escuela Técnica Superior de Ingeniería del Diseño, Universidad Politécnica de Valencia, 2020.

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



ESTUDIO DE LA DINÁMICA DE ROTACIÓN DE UN CUERPO RÍGIDO A TRAVÉS DEL ACELERÓMETRO DE UN DISPOSITIVO MÓVIL

STUDY OF THE ROTATION DYNAMICS OF A RIGID BODY THROUGH THE ACCELEROMETER OF A MOBILE DEVICE ACCELEROMETER

J. RODRIGUÉZ^{a†}, C. GARCÍA^b, Y E. GOVEA^a

a) Departamento de Matemática-Física, Universidad de Granma, Cuba. jrodriguez@udg.co.cu.†

b) Departamento de Ingeniería Informática, Universidad de Granma, Cuba.

† autor para la correspondencia

Recibido 27/05/2024; Aceptado 30/11/2024

La introducción de los dispositivos móviles en la enseñanza de la física ha cobrado gran auge en los últimos tiempos debido a la amplia gama de sensores que contienen y las funcionalidades de los mismos para realizar mediciones en tiempo real. Se realizó un estudio de la dinámica de rotación de un sólido rígido mediante el sensor acelerómetro acoplado a un teléfono inteligente. El problema estudiado es una modificación del aparato de laboratorio formado por una cruceta que gira horizontalmente alrededor de un eje vertical. Mediante una aplicación Android, desarrollada *ad hoc*, fue posible visualizar el comportamiento y medir las componentes radial y tangencial de la aceleración lineal. Se calcularon el momento de inercia y el torque de fricción de la cruceta. Finalmente, se discuten algunos casos particulares del problema inicial con el objetivo de mostrar las potencialidades de estos dispositivos en la enseñanza de la Física.

The introduction of the mobile devices in the teaching of physics has gained importance in recent times due to the ample range of sensors they contain and their ability to accomplish measurements in real time. The study of the dynamics of a rigid body rotation using the accelerometer of a smart phone was tackled. The problem is a modification of the standard laboratory device consisting in a crossbeam that rotates in a horizontal plane around a vertical axis. Through an *ad hoc* Android application, it was possible to visualize the behavior and to measure the radial and tangential components to a linear acceleration. Moreover, the moment of inertia and the friction torque of the crossbeam was calculated. Finally, we discuss some particular cases of the main problem that shows the potential of these devices for physics teaching.

PACS: Física general (general physics), dispositivo móvil (mobile device), cuerpo rígido sólido (Solid rigid body), sensor de acelerómetro (accelerometer sensor).

I. INTRODUCCIÓN

Las prácticas de laboratorio ocupan un lugar cada vez más importante en el proceso de enseñanza de las asignaturas de las ciencias básicas. En primer lugar, motivado por el carácter activo que le confieren al proceso de enseñanza-aprendizaje y porque, además, contribuyen a objetivar el conocimiento [1].

donde M es la masa, a y b son el ancho y el largo respectivamente del dispositivo móvil y h es la distancia entre los ejes de rotación del centro de masa donde se encuentra ubicado el sensor acelerómetro del dispositivo móvil y el eje ubicado en el centro de la cruceta con respecto al cual rota reportados en la tabla 1.

La enseñanza de la dinámica rotacional de un sólido rígido en el laboratorio de Física es un tópico que causa dificultad para su comprensión a pesar de su amplia aplicabilidad en la ciencia y en la ingeniería. Para contrarrestar dicho fenómeno se han realizado varios trabajos que muestran soluciones muy creativas a través de montajes experimentales que van desde muy simples a otros con un nivel mayor de complejidad [1–6], que le permiten al profesor, desde el punto de vista didáctico, facilitar la comprensión del contenido y motivar al estudiante.

Muchos son hoy en día los retos enfrentados por la didáctica para hacer llegar de una manera efectiva el conocimiento.

Esto ha motivado que surja la necesidad de buscar nuevos medios de enseñanza que ayuden a mostrar los fenómenos estudiados, por lo cual la enseñanza de la Física fue una de las pioneras en el uso de las tecnologías de la informática y las comunicaciones con este fin. Gracias a ello, se han creado nuevas oportunidades y alternativas para solventar las dificultades antes mencionadas. Por ello, es cada vez más creciente el surgimiento de plataformas y portales educativos que permiten a la comunidad académica el intercambio de conocimientos y cultura, convirtiendo a Internet y las autopistas de las comunicaciones en los medios para el cambio [7].

En la última década, el uso de dispositivos móviles (celulares, tablets, iphone, smartphones, entre otros) se ha incrementado en la población mundial de una manera acelerada. Sin embargo, aspectos poco divulgados de los DM son los relacionados con los sensores que contienen, aunque ciertamente estos han sido usados para la enseñanza de la Física [8]. El sensor más común es el acelerómetro, aunque algunos DM poseen de temperatura y presión entre otros. En el caso particular del acelerómetro, su empleo se ha difundido ampliamente en las más diversas formas de juego.

El uso del acelerómetro de un DM en la enseñanza de la física comenzó a ganar interés a partir de octubre del año 2012. En

el periodo 2012-2013, la revista de la Asociación Americana de Profesores de Física (AAPT por sus siglas en inglés), publicó una serie de trabajos en los cuales se mostraban las potencialidades del acelerómetro para estudiar, en tiempo real, diversos tipos de movimientos mecánicos como la caída libre, el movimiento circular, entre otros [9–12].

Desde esta perspectiva el enriquecimiento de las prácticas pedagógicas con nuevos y disímiles medios de enseñanza se hace necesario. Como era de esperar, el número de aplicaciones informáticas que han tenido como objetivo leer, visualizar y guardar los datos del acelerómetro para varios fines ha crecido en los últimos años, sin embargo, no todas tienen como finalidad explícita la enseñanza y las que, por el contrario, poseen excelentes prestaciones para ello no son gratuitas. Para solucionar esta disyuntiva, recientemente se desarrolló una aplicación Android denominada VirtualLab v1.0 [13]. De esta manera se accede a los datos del acelerómetro de cualquier DM y además permite adecuarla a los requerimientos de la enseñanza de la Física en el centro de educación superior.

Por lo tanto, dada la dificultad que dentro de los movimientos mecánicos genera a los estudiantes la rotación de un sólido rígido, en este trabajo se presenta un estudio de la dinámica de rotación de un sólido rígido mediante el acelerómetro acoplado a un DM. Además, se muestran las potencialidades que tiene este tipo de medio con el objetivo de incentivar su uso dentro de nuestros centros de enseñanza superior.

II. MATERIALES Y MÉTODOS

II.1. Descripción del montaje experimental

En la Fig. 1 se muestra una fotografía del montaje experimental utilizado.



Figura 1. Montaje experimental con dispositivo móvil acoplado.

Típicamente el equipo mostrado forma parte de un sistema compuesto por una cruceta unida a una polea cónica de varios

radios los cuales pueden girar alrededor de un eje de rotación vertical.

La descripción detallada del equipo puede encontrarse en las referencias [1, 3]. En ese caso, todas las mediciones de las magnitudes físicas involucradas se realizan con un temporizador modelo GZ-2A de fabricación china. En este trabajo, como se muestra en la Fig. 1, la modificación propuesta consiste en adjuntar a la cruceta un DM (teléfono inteligente) que posee un sensor acelerómetro con un rango de medición de $\pm 2g$, donde g es la aceleración de la gravedad.

II.2. Caso de estudio

Las ecuaciones dinámicas que rigen el movimiento del sistema descrito anteriormente son las siguientes:

Antes de que el hilo se suelte:

$$mg - T = ma_1; \quad Tr - M_f = I\alpha_1; \quad a_1 = \alpha_1 r \quad (1)$$

y después que el hilo se suelta:

$$-M_f = I\alpha_2; \quad a_2 = \alpha_2 r \quad (2)$$

donde a_1 y α_1 son las aceleraciones lineal y angular del sistema bajo la acción del torque provocado por la tensión T del hilo, a_2 y α_2 son las aceleraciones lineal y angular del sistema sin la acción de la tensión del hilo. Es importante destacar que ambas aceleraciones dependen de tiempo y están relacionadas a través del radio r de la polea alrededor del cual se enrolla el hilo (ver tabla 1), M_f es el torque realizado por la fuerza de fricción, m es la masa total del cuerpo (ver tabla 1) e I es el momento de inercia del sistema determinado por la siguiente expresión [1, 3]:

$$I = \frac{mgr}{\alpha_1 + \alpha_2} - \frac{\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2} mr^2 \quad (3)$$

Para determinar el momento de inercia del sistema debemos de tener en cuenta cómo afecta el momento de inercia del dispositivo móvil la medición del sensor. El momento de inercia del sistema está determinado por la suma de los momentos de la cruceta I_c y el del dispositivo móvil I_{DM} [1, 3]:

$$I = I_c + I_{DM} \quad (4)$$

El dispositivo móvil se puede modelar físicamente como una distribución de masa en forma de placa rectangular que rota en torno a un eje paralelo al eje que pasa por su centro de masa, y aplicando el teorema de los ejes paralelos obtenemos una expresión para calcular el momento de inercia:

$$I_{DM} = \frac{M(a^2 + b^2)}{12} + Mh^2 \quad (5)$$

donde M es la masa, a y b son el ancho y el largo respectivamente del dispositivo móvil y h es la distancia entre los ejes de rotación del centro de masa donde se encuentra ubicado el sensor acelerómetro del dispositivo móvil y el eje ubicado en el centro de la cruceta con respecto al cual rota reportados en la tabla 1.

Tabla 1. Magnitudes fundamentales utilizadas en este trabajo, nomenclatura y valor reportado con su error usado para el estudio.

Magnitud	Nomenclatura	Valor	Incertidumbre
Radio máximo de la cruceta	R_1	$5.028 \times 10^{-2} m$	0.002 m
Radio mínimo de la cruceta	R_2	$3.05 \times 10^{-2} m$	0.002 m
Distancia del dispositivo móvil	h	$6.216 \times 10^{-2} m$	0.002 m
Largo del dispositivo móvil	b	$11.25 \times 10^{-2} m$	0.01 m
Ancho del dispositivo móvil	a	$6.20 \times 10^{-2} m$	0.01 m
Masa del dispositivo móvil	M	$0.1937 \times 10^{-3} kg$	0.0001 kg
Masa total del cuerpo	m	$0.0958 \times 10^{-3} kg$	0.0001 kg

II.3. Descripción de la aplicación

VirtualLabv1.0 permite realizar las mediciones y mostrar en una gráfica en función del tiempo las componentes tangencial y radial de la aceleración. Además, mediante la aplicación es posible variar la frecuencia de muestreo y salvar los datos medidos en un fichero estructurado con cuatro columnas. En la primera columna se muestra el tiempo y en las restantes tres se muestran de manera ordenada los datos de las distintas aceleraciones experimentadas por el cuerpo en cada una de las direcciones de los ejes cartesianos.

Como la aplicación *VirtualLab* permite guardar las lecturas en las componentes x , y , z de la aceleración del cuerpo en función del tiempo de medición [13], entonces la aceleración promedio en un intervalo de tiempo se puede calcular a través de la ecuación:

$$\bar{a} = \frac{\int_{t_1}^{t_2} a(t) dt}{t_2 - t_1} \quad (6)$$

donde $a(t)$ es la aceleración obtenida con el dispositivo móvil, t_1 es el tiempo inicial del movimiento y t_2 es el tiempo de final. El cálculo numérico de la ecuación (6) se realizó mediante el método de los trapecios [14].

III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS

Primer caso de estudio.

En la figura 2a) se muestran las curvas experimentales de aceleración en función del tiempo medidas en las direcciones x , y , z cuando el DM está orientado como se indica en la Fig. 1. En estas condiciones se tiene que a_x coincide con componente tangencial de la aceleración, a_t , y a_y con la radial, a_r . Como el DM reposa sobre una superficie horizontal la lectura de a_z es constante e igual al valor de la gravedad.

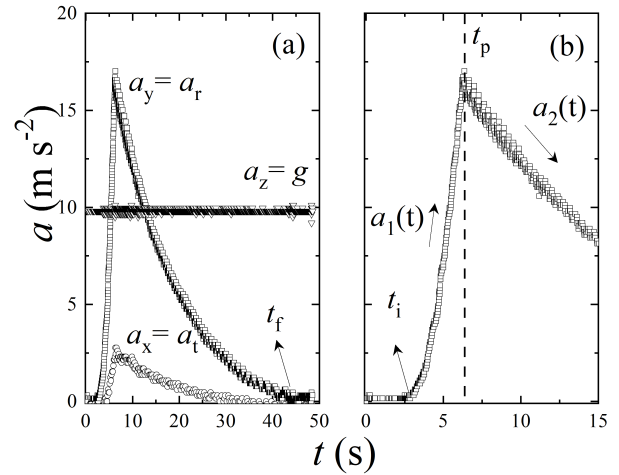


Figura 2. Curvas típicas mostradas por la aplicación. a) Identificación de las aceleraciones asociadas a las componentes cartesianas de los ejes registrados por el sensor. b) Curva de aceleración-deceleración del movimiento de la cruceta (ver detalles en el texto).

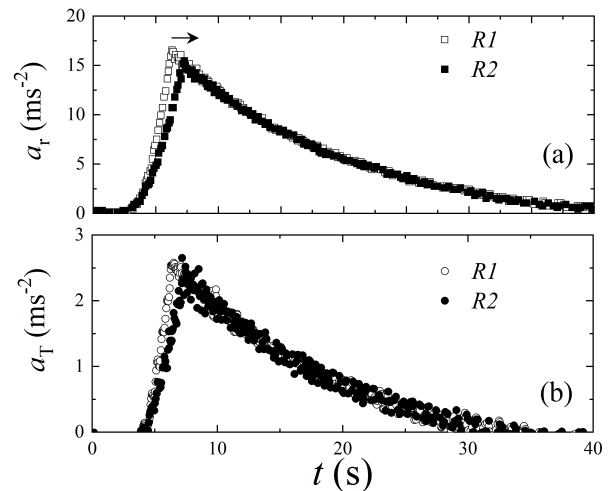


Figura 3. Curvas de aceleración en función del tiempo obtenidas para diferentes radios de la polea. a) Componente radial de la aceleración. b) Componente tangencial de la aceleración.

Nótese, que $a_t(t)$ y $a_r(t)$ tienen un comportamiento cualitativo muy similar; partiendo de cero ambas curvas aumentan, alcanzando un máximo, para luego disminuir hasta cero. Como puede verse de forma más detallada en la Fig. 2b), inicialmente el sistema está en reposo. Para $t \geq t_i$, las aceleraciones radial y tangencial comienzan a crecer y tienen

un máximo para $t = t_p$. Para tiempos mayores el hilo del que cuelga el cuerpo de masa m se desprende del sistema y ambas aceleraciones disminuyen siendo cero para $t \geq t_f$. La parte creciente (movimiento acelerado) la denominaremos $a_1(t)$ y a la decreciente (movimiento desacelerado) como $a_2(t)$. Es importante destacar que desde el punto de vista cuantitativo se obtuvo que $a_r(t) \geq a_2(t)$.

En la Fig. 3 se muestran los comportamientos para distintos tamaños de radios de las componentes radial y tangencial de la aceleración. Al igual que en la Fig. 2 se observa el mismo tipo de comportamiento creciente para el movimiento acelerado y decreciente para el movimiento desacelerado. Se observa además para ambas componentes un desplazamiento hacia mayores tiempos de t_p y una ligera disminución en el valor máximo de la aceleración asociado al tamaño del radio de la polea debido al aumento de la longitud del hilo enrollado.

Considerando los datos de $a_i(t)$ obtenidos cuando el hilo fue enrollado en el radio R_2 (ver Fig. 2) se obtuvo, mediante el cálculo numérico de la ecuación (6), que los valores de las aceleraciones medias son $\bar{a}_1 = (1.3239 \pm 0.0001) \text{ m/s}^2$ y $\bar{a}_2 = (0.8743 \pm 0.0001) \text{ m/s}^2$. Consecuentemente, los valores de las aceleraciones angulares son $\alpha_1 = (43.4066 \pm 0.0001) \text{ rad/s}^2$ y $\alpha_2 = (28.6656 \pm 0.0001) \text{ rad/s}^2$.

Además, de los datos reportados en la tabla 1 y las expresiones (3), (4) y (5) se obtuvo que el momento de inercia de la cruceta es $I_c = (1.72 \pm 0.06) \times 10^{-5} \text{ kg} \cdot \text{m}^2$. Es importante destacar que el valor obtenido para I_c es muy cercano al reportado por Hernández et al., pero utilizando un aparato experimental similar al nuestro acoplado al temporizador modelo GZ-2A de fabricación china [1].

IV. CONCLUSIONES

Se empleó con éxito un dispositivo móvil para el estudio de la dinámica de rotación de un sólido rígido. El uso de este tipo de dispositivo y la aplicación *VirtualLab v1.0*, permitió obtener información sobre el comportamiento en tiempo real de las aceleraciones radial y tangencial generadas por el sensor acelerómetro. Fue posible determinar que el valor del

momento de inercia de la cruceta es de $I_c = (1.72 \pm 0.06) \times 10^{-5} \text{ kg} \cdot \text{m}^2$. La similitud de este resultado con el reportado por otros autores demuestra la validez y las potencialidades del uso de los dispositivos móviles en el estudio de la dinámica del movimiento de los cuerpos.

Debido a la cantidad de dispositivos móviles en manos de nuestros estudiantes, este tipo de abordaje tiene como atractivos adicionales el de facilitarles la comprensión de los más diversos tipos movimientos mecánicos de una forma novedosa y motivadora.

REFERENCIAS

- [1] A. Ferreira, A. Gessa, Lat. Am. J. Phys. Educ. **5**, 183 (2011).
- [2] C. Collazo, Lat. Am. J. Phys. Educ. **3**, 446 (2009).
- [3] M. Fernández, L. Rodríguez, et al. Lat. Am. J. Phys. Educ. **9**, 1503 (2015).
- [4] C. Collazo, C. Mora, Revista Brasileira de Ensino de Física **34**, 1 (2012).
- [5] D. Rodríguez, J. Llovera, Lat. Am. J. Phys. Educ. **8**, 4504 (2014).
- [6] J. Agudelo, G. García, Lat. Am. J. Phys. Educ. **4**, 149 (2010).
- [7] J. Cabero, Tecnología y Comunicación Educativas Año **45**, 5 (2007).
- [8] V. L. Díaz-Melián, L. A. Rodríguez, F. Pedroso-Camejo, J. Mieres, Y. de Armas, A. J. Batista-Leyva, E. Altshuler, Rev. Cubana Fis. **36**, 4 (2019).
- [9] J. Kuhn, P. Vogt, Phys Teach. **50**, 23 (2012).
- [10] J. Chevrier et al., Phys. Teach. **51**, 376 (2013).
- [11] J. Kuhn, P. Vogt, Phys. Teach. **51**, 11 (2013).
- [12] J. Kuhn, P. Vogt, Eur. J. Phys. Educ. **4**, 34 (2013).
- [13] C. García-Suaréz, Aplicación Android para graficar tiempo real los datos del acelerómetro de un dispositivo móvil, Tesis de Diploma, Universidad de Granma. (2016).
- [14] W. Press, B. Flannery et al., Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing, University Press, Cambridge, (1992).

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



CONSTRUCCIÓN Y AUTOMATIZACIÓN DE UN SISTEMA DE CRECIMIENTO PARA CAPAS DELGADAS FERROELÉCTRICAS.

CONSTRUCTION AND AUTOMATION OF A GROWTH SYSTEM FOR FERROELECTRIC THIN FILMS.

A. J. ADAY - CANTERO^a, Y. PÉREZ - MARTÍN^a, Y. GONZÁLEZ - ABREU^a, A. PELÁIZ - BARRANCO^{a†}

Grupo de Materiales Ferroicos, Facultad de Física, Universidad de La Habana. San Lázaro y L, Vedado. La Habana 10400, Cuba; pelai@fisica.uh.cu[†]

[†] autor para la correspondencia

Recibido 20/10/2024; Aceptado 1/12/2024

La fabricación de capas delgadas es fundamental para el desarrollo tecnológico considerando la continua miniaturización de los dispositivos que se desarrollan. Las capas delgadas ferroeléctricas reciben especial atención por presentar, entre otras, mejores propiedades de almacenamiento de energía y efecto electrocalórico, respecto a las cerámicas en masivo. Para su obtención se han desarrollado diversos métodos de crecimiento: físicos, químicos y físico-químicos. La técnica de inmersión o dip-coating es de las menos costosas, es de fácil implementación y uso, y permite controlar la microestructura de la capa depositada. En este trabajo se diseñó, construyó y automatizó un sistema de crecimiento por inmersión para la obtención de capas delgadas ferroeléctricas. También se preparó una solución precursora para las capas mediante el método sol-gel. Posteriormente, se llevó a cabo el crecimiento de las capas y se analizó la muestra obtenida mediante SEM, proporcionando información detallada sobre su morfología.

The fabrication of thin films is fundamental for technological development, considering the continuous miniaturization of the devices being developed. Ferroelectric thin films receive special attention due to their superior energy storage properties and electrocaloric effect, among others, compared to bulk ceramics. Various growth methods have been developed for their production: physical, chemical, and physico-chemical. The dip-coating technique is one of the least expensive, easy to implement and use, and allows for control over the microstructure of the deposited layer. In this work, a dip-coating growth system was designed, built, and automated for the production of ferroelectric thin films. A precursor solution for the films was also prepared using the sol-gel method. Subsequently, the growth of the films was carried out, and the obtained sample was analyzed using SEM, providing detailed information about its morphology.

PACS: Ciencia de materiales (materials science), capas delgadas (thin films), métodos de deposición (deposition methods), dip-coating technique, ferroelectric materials

I. INTRODUCCIÓN

Las cerámicas ferroeléctricas son materiales importantes con una amplia gama de aplicaciones industriales y comerciales. Desde el descubrimiento del fenómeno de la ferroelectricidad, estas cerámicas han jugado un papel crucial en diversas industrias multimillonarias. Sus aplicaciones abarcan desde la producción de capacitores de alta permitividad dieléctrica, vitales para la industria electrónica, hasta el desarrollo de transductores piezoeléctricos y piroeléctricos, que son fundamentales en sistemas de seguridad y detección de incendios. Además, son fundamentales en la industria médica, en la fabricación de transductores de diagnóstico médico y dispositivos electroópticos [1, 2]. Esto ha traído como consecuencia que el desarrollo y la producción de láminas delgadas ferroeléctricas se ha convertido en un área de investigación fundamental debido a las notables propiedades que suelen presentar en el ámbito del almacenamiento de energía [3]. A diferencia de los estudios centrados en cerámicas masivas, estas láminas delgadas ofrecen ventajas significativas, lo que ha suscitado un gran interés en la comunidad científica y tecnológica [4]. Sus aplicaciones abarcan desde la microelectrónica hasta otros sectores tecnológicos, y su importancia radica en su capacidad para proporcionar un rendimiento superior en diversas configuraciones y dispositivos, además de requerir menos

materiales para su obtención [5].

Existen diversas técnicas para la obtención de estas láminas, entre las que destaca el método de "Dip-Coating" o método de deposición por inmersión, que resalta por su simplicidad, menor requerimiento de equipamiento y bajo costo [6]. Su principal atractivo radica en la posibilidad de controlar la microestructura de las películas depositadas, lo que lo posiciona como un método muy prometedor para la síntesis de capas delgadas.

Este método es adaptable para depositar todo tipo de materiales, incluido polímeros, cerámicas, híbridos, nanocompuestos, biomoléculas, entre otros. Todas estas deposiciones son posible realizarlas en sustratos planos y curvos, sin pérdidas de solución [6]. Los equipos de dip-coating disponibles en el mercado ofrecen una alta precisión y reproducibilidad, siendo capaces de manejar procesos complejos con control automatizado de varias variables. Sin embargo, estos equipos comerciales suelen ser costosos y pueden exceder el presupuesto de pequeños laboratorios o proyectos educativos. Por otro lado, un sistema de dip coating casero, aunque menos preciso, presenta una solución económica y accesible.

Por estos motivos, este trabajo tiene como finalidad la construcción e implementación de un sistema experimental

para el crecimiento automatizado de láminas delgadas mediante el método de “Dip-Coating”. Gracias a su simplicidad, fue posible realizarlo con una mínima disposición de recursos, incluso se usaron materiales reciclados tanto para el encapsulado del montaje como para partes importantes del sistema, como el motor de pasos y el portamuestras.

II. DISEÑO EXPERIMENTAL

El sistema experimental diseñado para el crecimiento de capas delgadas implica un mecanismo que permite el desplazamiento ascendente y descendente de una plataforma. Dicho movimiento se efectúa empleando un motor de pasos, haciendo girar su eje en distintos sentidos. Este mecanismo se ha desarrollado con el fin de facilitar el proceso de deposición de capas delgadas ferroeléctricas de manera controlada y precisa.

II.1. Desarrollo del Hardware

La operatividad de este sistema se basa en la activación secuencial del motor, lo que da lugar a un movimiento uniforme de la plataforma en ambas direcciones. Al activar el motor en un sentido específico, la plataforma experimenta un desplazamiento ascendente, mientras que, al invertir el giro del motor, se logra el movimiento descendente de la plataforma. El motor empleado para el desarrollo de este sistema se recicló de un lector de disquetera en desuso (unidad de disquete Sony FD-83 de 3½ pulgadas). Es un motor de pasos bipolar de 8 pasos por vuelta, 45° por paso y 5 V para su alimentación. La secuencia de pulsos utilizada para controlar motores de pasos bipolares es bien conocida, mostrada en la Tabla 1. Lo que resulta particular a cada aplicación de estos motores es el tiempo entre pasos, que es el parámetro que define la velocidad a la que gira el motor.

Pasos	In 1	In 2	In 3	In 4
1	1	0	1	0
2	1	0	0	1
3	0	1	0	1
4	0	1	1	0

Tabla 1. Secuencia de voltajes digitales [5].

Mediante una secuencia de activación del motor, mostrada en la tabla 1, que abarca los pasos del 1 al 4, se logra inducir su movimiento en un sentido específico. Por otro lado, al invertir esta secuencia, retrocediendo del paso 4 al 1, se consigue cambiar la dirección del giro del motor de manera efectiva. Para controlar la velocidad de descenso y ascenso del portamuestras unido al motor es esencial considerar aspectos clave, tales como el recorrido total del portamuestras (d), la cantidad de pasos necesarios para completar este recorrido (N) y el intervalo de tiempo entre cada paso (t_p). Dado que la extensión total del recorrido del portamuestras (la longitud del eje del motor) es constante, y por consiguiente, la cantidad de pasos requeridos para dicho recorrido es invariable, se deduce que el parámetro crucial a controlar para ajustar la

velocidad (v) es el tiempo entre pasos (t_p) (Ecuación 1):

$$v = \frac{d}{t} = \frac{d}{N \cdot t_p} \quad (1)$$

donde t es el tiempo total del recorrido y t_p está expresado en milisegundos.

Para el control del motor se utilizó el circuito integrado L293D, el cual está diseñado para manejar cargas inductivas tales como relés, solenoides, motores de corriente continua y motores de pasos bipolar [5,8]. En la Fig. 1 se presenta la sección del circuito que contiene el L293D y sus conexiones con el motor de pasos. En el sistema se utilizó un Arduino Leonardo, para gestionar la lógica y el control de los diferentes componentes, pues su versátil lenguaje de programación y su capacidad para controlar múltiples pines configurándolos previamente como entradas y salidas permite la integración de controladores y motores, lo que facilita el monitoreo y la regulación del proceso de recubrimiento. Se programaron ciclos automáticos para controlar el tiempo de inmersión y extracción, así como la velocidad de movimiento, a partir de los datos introducidos por el usuario. Esto no solo mejora la eficiencia del proceso, sino que también reduce la posibilidad de errores humanos.

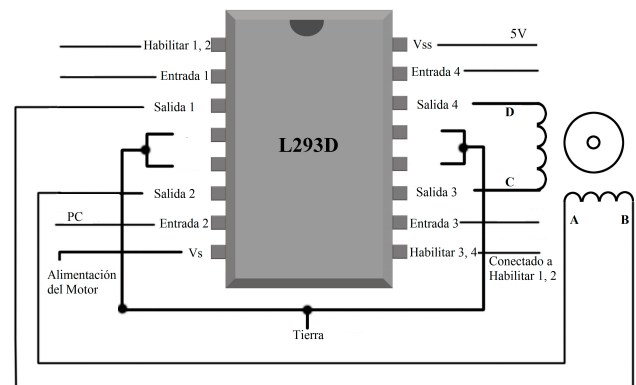


Figura 1. Conexiones del Integrado L293D para el control del motor de pasos [5].

La Fig. II.1 muestra el sistema terminado, donde cada uno de los números representan una parte del montaje que se detallan a continuación:

1. Cable de alimentación externa de 6.0V.
2. Cable Micro-USB de conexión con el ordenador.
3. Arduino Leonardo.
4. Controlador L293D.
5. Motor de pasos Floppy.
6. Soporte para el portamuestras.
7. Base para colocar el recipiente con la solución.

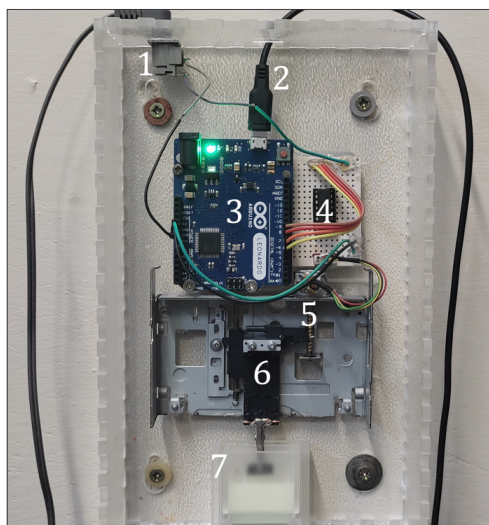


Figura 2. Sistema experimental con los componentes más importantes enumerados (ver texto).

II.2. Desarrollo del Software

El software proporciona la interfaz que permite a los usuarios interactuar con el sistema automatizado. Esto puede incluir paneles de control, interfaces gráficas de usuario o incluso comandos de texto que permiten supervisar y dirigir el funcionamiento del sistema. Además, el software proporciona la lógica de control que permite al sistema automatizado tomar decisiones en tiempo real, que puede estar basada en algoritmos complejos, lógica de programación o incluso inteligencia artificial, dependiendo de la sofisticación del sistema. Otra razón importante es la recopilación y análisis de datos. El software puede recopilar continuamente datos del sistema automatizado, como rendimiento, errores, tiempos de operación, entre otros, y luego presentar estos datos de manera significativa para usuarios a través de visualizaciones o informes detallados. También facilita la capacidad de realizar ajustes y actualizaciones en el sistema sin necesidad de modificar el hardware físico. Esto permite una mayor flexibilidad y adaptabilidad del sistema a medida que evolucionan los requisitos. Para el desarrollo del software, es importante destacar que este se realizó en dos etapas, siendo la primera donde se realizó la programación en Arduino y la segunda, aquella en la que se hizo la aplicación usando Python para controlar el sistema desde el ordenador, con una interfaz sencilla de usar, de manera que permita una interacción directa del usuario para controlar el funcionamiento del sistema a través de determinados parámetros iniciales. Para ello se utilizó la librería CustomTkinter de Python, que es muy empleada para el desarrollo de interfaces gráficas modernas. Una vez creada se implementó la comunicación con el Arduino.

La aplicación, mostrada en la Fig. 3, cuenta con dos campos vacíos para ingresar los valores de velocidad y tiempo. El valor de la velocidad (mm/min), establece la velocidad de movimiento de la placa una vez colocado en el soporte, y la variable Tiempo (s), fija el tiempo que debe permanecer el sistema detenido una vez termine su recorrido de descenso y quede la parte del portamuestras sumergida en la solución. Se observa en tiempo real el estado actual del sistema, así como

el tiempo para que finalice todo el proceso de inmersión y extracción. Consta de 3 botones:

- **Iniciar:** Una vez presionado, los datos escritos en los campos de velocidad y tiempo, son enviados a través del puerto serial al Arduino, el cual toma esos datos y comienza el proceso. Los campos de velocidad y tiempo quedan inhabilitados para evitar errores en la comunicación.
- **Detener:** Cuando se presiona, se envía una señal al Arduino, para que detenga el proceso, se realizó de manera que cuando la señal se envíe, este no se detenga instantáneamente, sino que termine de ejecutar un último ciclo.
- **Salir:** Cierra la aplicación.

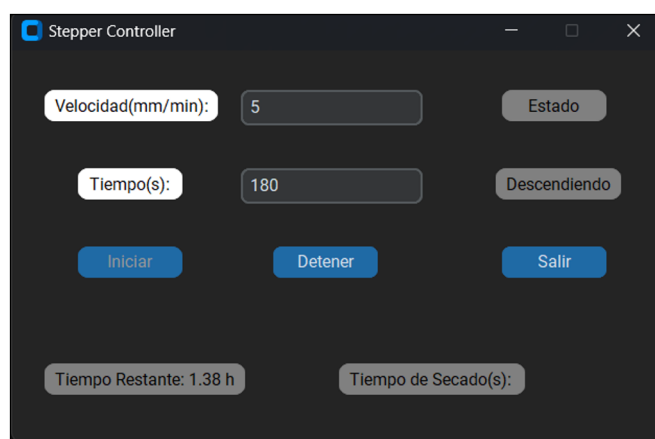


Figura 3. Interfaz de usuario creada para el programa que ilustra el proceso de descenso y el tiempo de duración de un ciclo.

III. DEPOSICIÓN DE LAS CAPAS DELGADAS

El proceso para obtener las capas delgadas se realizó en dos etapas. En la primera, se preparó la solución precursora. Para la segunda etapa se realizó el crecimiento de las capas, utilizando el sistema mencionado previamente, seguido de los tratamientos térmicos. Los polvos cerámicos utilizados en la primera etapa, durante la preparación de la solución precursora, provienen de un material de la familia de ferroeléctricos Aurivillius, que han recibido gran atención debido a su naturaleza libre de plomo, alta polarización espontánea, su comportamiento libre de fatiga, alta temperatura de Curie y sus propiedades piezoeléctricas los hacen buenos candidatos para aplicaciones piezoeléctricas a altas temperaturas y como memorias de almacenamiento [9–11]. Se utilizó la familia de compuestos $Sr_{1-x}Ba_xBi_2Nb_2O_9$, de los cuales destaca $Sr_{0.70}Ba_{0.30}Bi_2Nb_2O_9$ (SBBN – 30, $x = 0.30$), por presentar las mejores propiedades piezoeléctricas y ferroeléctricas dentro de esta familia de compuestos [2], y por tanto fue la cerámica elegida para su estudio en forma de capa delgada.

III.1. Método Dip-Coating o Método de Deposición por Inmersión

Entre los diversos métodos químicos para la deposición de capas delgadas, el método Dip-Coating o de deposición por

inmersión representa el más antiguo de los procesos de recubrimiento. Básicamente, el proceso puede separarse en tres importantes etapas [7, 12]:

1. Inmersión y tiempo de permanencia: El sustrato se sumerge en la solución precursora a una velocidad constante, seguida por cierto tiempo de permanencia, con el objetivo de dejar tiempo de interacción suficiente del sustrato con la solución de recubrimiento.
2. Deposición y drenaje: Al extraer el sustrato a una velocidad constante, estableciéndose un régimen en estado estacionario donde intervienen la suspensión, el sustrato en movimiento y la atmósfera. Como resultado, se forman dos capas de líquido: una exterior, que retorna al baño, y otra interior, que queda adherida al sustrato, que resulta en la deposición de la película. La capa líquida drena con facilidad cuando la velocidad de extracción es reducida, dando lugar a espesores finales bajos, y drena con más dificultad cuando la velocidad es elevada.
3. Evaporación: El disolvente se evapora del fluido formando la película delgada tal y como se deposita, lo cual puede ser acelerado por un secado con calor. Posteriormente, el recubrimiento puede ser sometido a tratamiento térmico adicional para eliminar los residuos orgánicos restantes y favorecer la cristalización de los óxidos funcionales.

III.2. Sol-Gel. Método Pechini.

El proceso sol-gel se define como una ruta coloidal utilizada para sintetizar cerámicos con una fase intermedia, incluyendo un estado sol o gel, donde se denomina Sol a la suspensión estable de partículas en un líquido y el Gel es una malla tridimensional porosa interconectada, que se puede expandir y cuyo tamaño está limitado por el medio que lo contiene [12]. Los precursores más utilizados en el proceso sol-gel son los compuestos metal-orgánicos, cuya fórmula química es: $M-(OR)_n$, donde M es el metal ($M = Si, Ti, Zr, Al, Sn...$), OR es un grupo alcóxido ($-OCH_3, -OCH_2CH_3...$) y n es la valencia del metal [12].

El Método Pechini es un método Sol-Gel desarrollado originalmente para aquellos materiales que no favorecían el equilibrio de la hidrólisis. En los últimos 30 años ha sido ampliamente desarrollado y extendido para la síntesis de materiales eléctricos y magnéticos, incluyendo materiales ferroeléctricos. El proceso involucra la formación de un quelato (compuesto químico en el cual un ion metálico central está unido a un ligando) entre cationes mixtos (disueltos como sales en una solución acuosa) con un ácido hidroxicarboxílico (por lo general se usa el ácido cítrico). Primero ocurre la quelación de los cationes y luego, con la ayuda de polialcoholes, los quelatos se entrecruzan para crear un gel mediante esterificación. Esto tiene la clara ventaja de permitir el uso de metales que no tienen especies hidroxilo estables [13]. Los compuestos gelificados se sinterizan, pirolizando lo orgánico y dejando nanopartículas, que son reducidas

por el gel pirolizado. La idea general es distribuir los cationes a nivel atómico por toda la estructura del polímero. El calentamiento (calcinación) de las resinas en el aire u otros gases provoca la descomposición del polímero y la carbonización a aproximadamente 400 °C. Se supone que hay poca segregación de los distintos cationes que quedan atrapados en el carbón. Posteriormente, los cationes se oxidan a cristalitas de óxidos de cationes mixtos a 500-900 °C. La formación de los precursores cerámicos sucede en dos etapas: primero ocurre la quelación entre los cationes complejos y ácido cítrico y luego la poliesterificación del exceso de ácido hidroxicarboxílico (ácido cítrico) con Etilenglicol en una solución ligeramente acidificada. Este líquido denso se seca mediante la aplicación de calor o vacío, lo que da lugar a un precursor gelatinoso para polvos (o películas) cerámicos. Un último proceso de calcinación elimina todas las sustancias orgánicas, resultando en un polímero metal-orgánico [?, 13]. Una de las limitaciones del método Pechini, como ocurre con muchas otras técnicas, es la falta de control sobre el tamaño y la morfología de los materiales. En los métodos tradicionales sol-gel, las partículas son parte de una estructura de gel, mientras que en el método Pechini, los cationes metálicos quedan atrapados en el gel polimérico. Esto limita la capacidad para crear formas controladas y conduce a la formación de aglomerados de cristalitas duros. El tamaño del producto final está influenciado, hasta cierto punto, por el proceso de sinterización y la concentración inicial de metales en el gel [13].

III.3. Solución Precursora.

La preparación de la solución precursora constó de dos etapas, la primera en la que se prepararon dos soluciones, una de ácido nítrico con el compuesto cerámico (solución ácida) y otra que contiene una resina preparada usando el método Pechini, y una segunda etapa en la que ambas soluciones se mezclaron en partes iguales para obtener el resultado deseado. La primera se preparó a partir de los polvos del compuesto cerámico anteriormente mencionado (SBBN-30), obtenido por el método tradicional de mezcla de óxidos. Se disolvieron 0.505 g del compuesto en ácido nítrico al 10% (10 ml de ácido nítrico ($HNO_{3(ac)}$) en 100 ml de agua destilada), para optimizar el proceso se mantuvo en agitación constante, en un agitador magnético, a una temperatura de 80 °C durante 1 hora. Para la resina, se empleó el método Pechini, que consiste en la esterificación como consecuencia de la reacción entre un ácido carboxílico y un alcohol catalizado por un ácido. Para la muestra en cuestión se utilizó dietilenglicol y ácido cítrico. El objetivo de este paso es obtener un polímero en forma de enrejado polimérico donde quedan atrapados los iones [6]. Esta mezcla fue calentada a 70 °C y mantenida en agitación constante durante 1 hora. Finalmente se añaden partes iguales de ambas soluciones, y se mezclan agitándose constantemente a una temperatura de 90 °C durante 1 hora. La solución resultante se muestra en la Fig. 4.

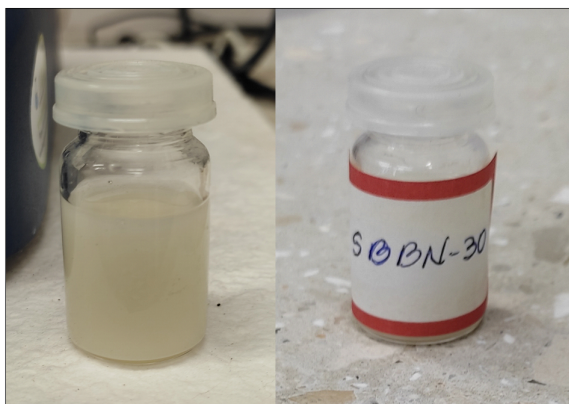


Figura 4. Imagen de la solución precursora (SBBN-30) envasada (izquierda) y etiquetada (derecha).

Las capas delgadas fueron depositadas a temperatura ambiente sobre un sustrato de óxido de indio y estaño (también conocido como ITO, por sus siglas en inglés, Indium Tin Oxide) aplicando dos velocidades de extracción, 5 mm/min y 10 mm/min. Se realizó un solo depósito sobre el sustrato. Luego fueron sometidas a un tratamiento térmico hasta 100 °C durante 30 minutos, con una velocidad de calentamiento de 25 °C/h. Finalmente, se sometieron a un último tratamiento térmico hasta 450 °C durante 30 minutos, con una velocidad de calentamiento de 100 °C/h. Luego se estudió la morfología de las muestras obtenidas utilizando un Microscopio Electrónico de Barrido (SEM, por sus siglas en inglés), el cual permite examinar directamente la superficie de la muestra. Para la obtención de estas imágenes se utilizó un equipo SEM TESCAN VEGA 3.

IV. RESULTADOS

Las películas depositadas estaban libres de grietas y tenían un aspecto uniforme sobre el sustrato como se muestra en la Fig. 5, para la capa crecida a 5 mm/min, como ejemplo de los resultados obtenidos. Se aprecia la diferencia en la coloración entre la sección donde fue depositada la capa delgada y el sustrato, siendo esto un indicador positivo que permite inferir sobre la correcta deposición de la capa. El crecimiento realizado a 10 mm/min presentó resultados similares.

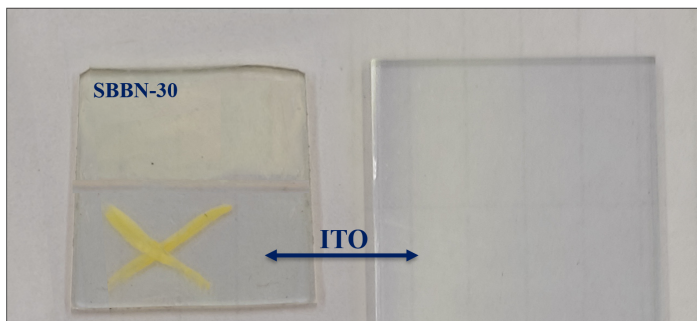


Figura 5. Sustrato donde se creció la muestra a 5 mm/min (izquierda) y una porción donde no se realizó ningún crecimiento (derecha).

En la figura 6 se muestran las imágenes tomadas en el SEM, que corresponden a las muestra obtenida para los dos valores de velocidad de extracción propuestas, 5 mm/min y 10 mm/min. Se puede inferir de la observación de las imágenes que se logra el depósito de manera efectiva sobre

el sustrato, resaltando una influencia notable en la velocidad de extracción de la muestra. En el crecimiento a 5 mm/min se observa una deposición más homogénea respecto a la realizada a 10 mm/min. Esta última creció formando "islas" con una mayor densidad de granos, lo cual se asocia a un proceso de crecimiento incompleto en cuanto a la cantidad de deposiciones. Estudios similares han mostrado la obtención de capas delgadas mediante este método aplicando más de una deposición [2], obteniendo capas homogéneas con una densidad de grano mayor a las nuestras.

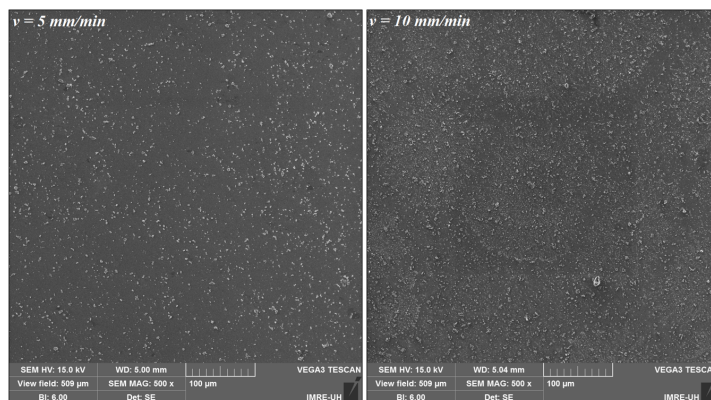


Figura 6. SEM para capas crecidas a 5 mm/min (izquierda) y 10 mm/min (derecha). Se muestran imágenes en iguales condiciones, aumento 500x.

En la figura 7 se muestra otra imagen del crecimiento realizado a 10 mm/min, con magnificación de 2.00 kx en una de las zonas con mayor densidad, donde podemos ver claramente la presencia del compuesto sobre el sustrato.

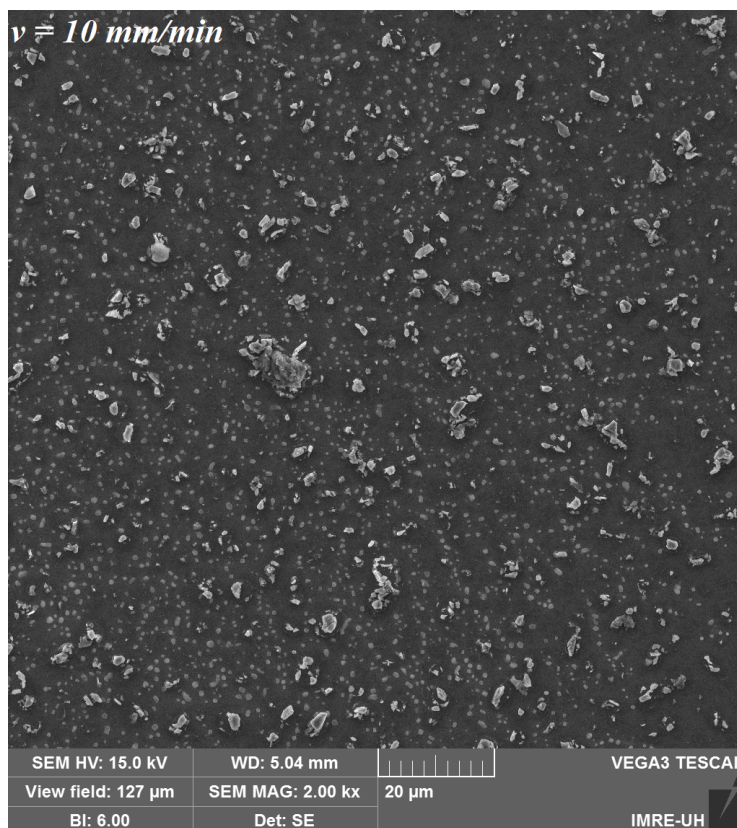


Figura 7. SEM para capa crecida a 10 mm/min, aumento 2.00 kx.

V. CONCLUSIONES

Tras el desarrollo e implementación de un sistema de crecimiento por inmersión para la obtención de capas delgadas ferroeléctricas, se han evidenciado varios resultados significativos. La combinación de herramientas como un motor de paso, la automatización mediante Arduino y un programa en Python ha demostrado ser fundamental para el éxito de este proyecto. Esto puso de manifiesto la importancia que tiene el uso de materiales reciclados cuando no se cuentan con los recursos necesarios. Gracias a este sistema, es posible tener un control preciso del proceso de inmersión con el fin de buscar los parámetros óptimos del crecimiento, para lograr una mejor homogeneidad y tamaño de capa deseado. La capacidad de controlar parámetros como la velocidad de extracción e inmersión, así como el tiempo sumergido, a través de Python, facilita la personalización y adaptabilidad del proceso, mejorando la interacción con el sistema para los investigadores. Por último, los resultados de las imágenes obtenidas en el SEM fueron fundamentales para validar este sistema.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen al Programa Nacional de Ciencias Básicas (Proyecto PN223LH010-068). Agradecimientos al equipo del Laboratorio de LUCES-Estructural del Instituto de Ciencia y Tecnología de los Materiales, en especial a Nicolás Sirgado.

REFERENCES

- [1] D.H. Kang, Y.H. Kang, *J. Microel. Packaging Soc.*, **20**, 25 (2013).

- [2] Y. González Abreu, A. Pelaíz Barranco, P. Saint Gregoire, C. E. Moreno Crespo, H. Limborço and J. C. González, *J. Adv. Dielectrics*, **7**, 5, 1750035 (2017).
- [3] A. Fernandez, M. Acharya, H. Lee, J. Schimpf, Y. Jiang, D. Lou, Z. Tian, L. Martin, *Adv. Mat*, **34**, **30**, 2108841 (2022).
- [4] R. Mondal, A. M. Hasan, J. M. Baik, Y. Yang, *Mat Today*, **66**, 273 (2023).
- [5] C. E. Moreno Crespo, «Sistemas de crecimiento e histéresis ferroeléctrica para capas delgadas», Tesis de Ingeniería, Facultad de Física, Universidad de la Habana, La Habana, (2016).
- [6] D. R. Ceratti, B. Louis, X. Paquez, M. Faustini, D. Grosso, *Adv. Mat*, **27**, (2015), 4958.
- [7] T. Schneller, R. Waser, M. Kosec, D. Payne (eds.), *Chemical solution Deposition of Functional Oxide Thin Films*, cap.10, p.233 (2013).
- [8] V. Phoa, H. Rakhmad, *J. arus elektro Indones*, **10**, 1, 6 (2024).
- [9] A. Moure, *Appl. Sci.*, **8**, **1**, (2018).
- [10] S. I. Shkuratov, C. S. Lynch, *J. Materiomics*, **8**, 4, 739 (2022).
- [11] A. Fernandez, M. Acharya, H. Lee, J. Schimpf, Y. Jiang, D. Lou, Z. Tian, L. Martin, *Adv. Mat.*, **34**, **30**, 2108841 (2022).
- [12] <https://librosaccesoabierto.uptc.edu.co/index.php/editorial-ptc/catalog/download/104/131/3315?inline=1>
- [13] L. Klein, M. Aparicio, A. Jitianu (eds.), *Handbook of Sol-Gel Science and Technology*, Vol.2, (Springer Nature, Suiza, 2018), cap.35, p.1067.
- [14] R. W. Schwartz, *Chem. Mat.*, **9**, 11, 2325 (1997).
- [15] A. Mohammed, A. Abdullah, *Scanning Electron Microscopy (SEM): A Review*, Proceedings of 2018 International Conference of Hydraulics and Pneumatics - HERVEX, Baile Govora, Romania, 7 November 2018.

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



THE 2024 PHYSICS NOBEL PRIZE: THE FOUNDATIONS OF ARTIFICIAL INTELLIGENCE

EL PREMIO NOBEL DE FÍSICA DEL 2024: LOS FUNDAMENTOS DE LA INTELIGENCIA ARTIFICIAL

R. MULET^{a†} AND C. DÍAZ-FALOH^a

Centro de Sistemas Complejos y Departamento de Física Teórica. Facultad de Física, Universidad de La Habana, Cuba. roberto.mulet@gmail.com[†]
[†] corresponding author

Recibido 10/10/2024; Aceptado 28/10/2024

The 2024 Nobel Prize in Physics was jointly awarded to John Hopfield and Geoffrey Hinton “for foundational discoveries and inventions that enable machine learning with artificial neural networks”. Here we try to explain the meaning of this statement and why we consider their contribution to be an important advance for Physics. This prize is probably the definitive demonstration that once again in History, Physics is more than the study of inanimate natural objects.

El Premio Nobel de Física del año 2024 fue entregado a John Hopfield y Geoffrey Hinton por “descubrimientos fundacionales e invenciones que permiten el aprendizaje automático con redes neuronales artificiales”. Aquí tratamos de explicar el significado de esta sentencia, y por qué consideramos que sus contribuciones son importantes avances para la Física. Este premio es probablemente la demostración definitiva de que la Física, una vez más en la historia, es más que el estudio de los objetos inanimados de la naturaleza.

PACS: Physics Nobel prize, artificial intelligence, neural networks

I. INTRODUCTION

In 2024, every educated person with internet access has heard about ChatGPT. It entered our worldwide web with such prominence that many believe it may be as disruptive, or even more so, than the Google search engine. This impact likely contributed to the Nobel Prize Foundation awarding a (for some) surprising Nobel Prize in Physics this year.

According to the Nobel Foundation: *The Nobel Prize in Physics 2024 was awarded jointly to John J. Hopfield and Geoffrey E. Hinton “for foundational discoveries and inventions that enable machine learning with artificial neural networks.”*

If the corresponding question is posed to an artificial intelligence on the web, the answer tends to be more detailed and specific: *The 2024 Nobel Prize in Physics was awarded to John J. Hopfield and Geoffrey E. Hinton for their foundational discoveries and inventions that enable machine learning through artificial neural networks. According to the Royal Swedish Academy of Sciences, their work has utilized tools from physics to develop methods that form the basis of today’s powerful machine learning technologies.*

Still, it may not be clear to everyone what ChatGPT has to do with Physics. Let us explain it in more detail.

II. JOHN HOPFIELD: THE MEMORY

John Hopfield has had an extraordinary career in Physics. Like many who began their training in the late 1950’s, he worked extensively in Solid State Physics, where one of his main contributions was the introduction of the concept of polariton [1]. After a few years, he became interested

in Biological Physics, particularly in the accuracy of DNA replication, leading him to introduce the concept of kinetic proofreading [2].

However, it was in the early 1980’s that he began working on the subject that earned him this Nobel Prize. Two of his articles [3,4] presented an artificial network that could serve as a memory and that would later be referred to as Hopfield Network, after him. In short, the system that he proposed consists of a collection of interconnected artificial neurons (or nodes), where each neuron can represent a binary state, typically +1 or -1. The network is fully connected, meaning each neuron is connected to every other neuron, except for self-connections. The behavior of a Hopfield Network is governed by an energy function that quantifies the network’s state. The energy E can be expressed mathematically as:

$$E = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} w_{ij} x_i x_j - \sum_i b_i x_i \quad (1)$$

where w_{ij} are the weights between neurons i and j , and x_i is the state of neuron i . Notice that the states of the neurons in the Hopfield model are analogous to the orientations of spins in the Ising model. The weights of the neural network represent interaction terms, while biases b_i play the role of external fields. From this expression for E , it is clear that this field of research is intimately connected with Spin Glass Theory, which granted Giorgio Parisi a Nobel Prize in 2021 (Rev. Cubana Fis. 28, 128 (2021)).

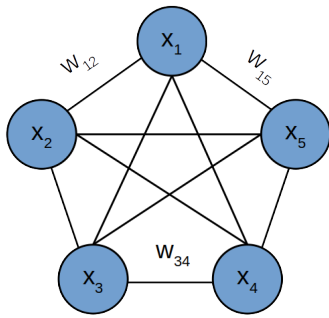


Figure 1. Hopfield network with five neurons. Each neuron is connected with the other four. Only a few weights are represented for visual purposes.

Hopfield had an important intuition that was not previously explored by the Spin Glass community. He proposed that the states of the network could evolve following a simple rule. Define for each neuron a field $h_i = \sum_j w_{ij}x_j$, such that $x_i = 1$ if $h_i > 0$ or -1 when $h_i < 0$. This is known as the Hebb rule; if the weights are symmetric, such dynamics are guaranteed to lead to stationary states identified as memories.

The clear connection with Physics goes beyond metaphorical inspiration; soon it became possible to exploit techniques developed in disordered systems to analytically compute relevant quantities. For example, Gardner computed the storage capacity of a Hopfield Network [5], which is always $P < 0.15N$, where N is the number of nodes in the network and P is the number of patterns that can be reliably stored. Such analytical results inspired others to seek networks with larger storage capacities [6] and turned this subject into a new field of research [7].

III. HINTON: LEARNING STRUCTURES

Geoffrey Hinton studied experimental psychology before obtaining a PhD in Artificial Intelligence (AI) in 1978, at a time when personal computers were rare and laptops did not exist. Just a few years after his PhD, he examined Hopfield Networks and altered their dynamics. While Hopfield defined variable values s_i deterministically by local fields h_i , Hinton proposed that the Network's state follows a probabilistic (Boltzmann) distribution:

$$P(\{x\}) = \frac{e^{-\beta E(\{x\})}}{Z} \quad (2)$$

where β is a tuning parameter and Z is a normalization factor recognized by physicists as the partition function of this problem. This machine is called a Boltzmann Machine [8,9] and does not act as memory; instead, it generates new patterns.

To clarify differences: once trained with P patterns, the Hopfield model can produce one of those patterns (this represents memory). In contrast, once trained, a Boltzmann machine can generate new patterns respecting the statistical distribution of the training data.

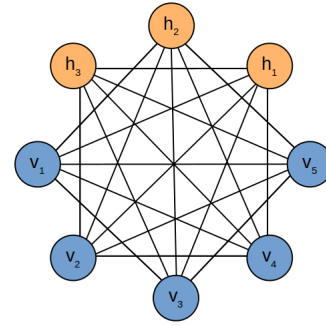


Figure 2. Boltzmann Machine

Although initially slow and thus less utilized, a slightly modified version known as Restricted Boltzmann Machines (RBMs) [10–12] became versatile tools whose structure inspired more complex machines emerging in this field. While both Hopfield and Boltzmann machines are fully connected networks (each node connects with every other), RBMs consist of two consecutive layers; when people refer to Deep Learning, they usually mean machines with multiple consecutive connected layers—the idea was already there.

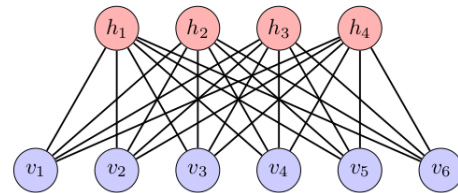


Figure 3. Restricted Boltzmann Machine

Hinton continued advancing AI through inventions like backpropagation [13], Deep Belief Networks [14], AlexNet [15], etc., transforming basic science from the 1980's into real applications just a few years later.

IV. ARTIFICIAL INTELLIGENCE IN PHYSICS

Artificial Neural Networks (ANNs) are playing an increasingly important role in modern physics, influencing a wide range of research areas.

In materials science, for instance, fundamental properties—from band gaps to emergent behaviors—are theoretically derived from solving the Schrödinger equation for electrons. However, the inherent computational complexity of quantum mechanics renders exact analytical solutions nearly impossible. ANNs have demonstrated their usefulness as function approximators [16], learning the energy landscapes of various models. This deep learning approach significantly reduces the computational resources required while maintaining high accuracy and resolution. As a result, ANNs have facilitated significant progress in tackling quantum-mechanical many-body problems [17,18], including the prediction of new photovoltaic materials.

Similarly, ANNs have improved the resolution of physics-based climate models without demanding additional computational power, leveraging the vast amount of data available on climate variables [19,20].

Beyond simulation, ANNs serve as powerful tools for pattern recognition in data analysis. During the search for the Higgs boson, ANNs were trained to identify specific patterns in the massive datasets generated at the CERN Large Electron-Positron Collider (LEP) during the 1990s [21]. Neural networks also played a crucial role in analyzing the data that ultimately led to the discovery of the Higgs boson at CERN's Large Hadron Collider (LHC) in 2012 [22].

In astronomy and astrophysics, ANNs are widely employed for tasks such as spectral classification, image processing, and inference. A recent example is the use of ANNs in analyzing data from the IceCube neutrino detector at the South Pole, which led to the creation of a neutrino image of the Milky Way [23]. Exoplanet transits have been identified by the Kepler Mission using ANNs [24], and the Event Horizon Telescope relied on neural networks to process the data that produced the first-ever image of a black hole at the center of the Milky Way [25]. Additionally, the Square Kilometre Array (SKA) uses ANNs to perform regression on high-redshift data, a key task in its mission to study the universe at centimetre and metre wavelengths [26].

These are just a few examples of the many applications of ANNs in modern physics, showcasing their broad impact. Overall, ANNs have given physics a powerful boost in terms of simulation and data processing. Their use has lowered computational costs and made it easier to analyze complex systems, leading to faster and more accurate results across many areas of research.

V. CONCLUSIONS

This Nobel Prize in Physics represents more than the recognition for pioneers who conducted groundbreaking work; it certifies that Physics must be understood beyond traditional boundaries. Many were taught in high school that Physics was merely about studying the motion of inanimate objects. However, after three decades of active research, We can not agree more with those who awarded this prize: Physics encompasses not only problems but also methods, concepts, and ideas.

REFERENCES

- [1] J.J. Hopfield. *Phys. Rev.* 112: 1555 (1958).
- [2] J.J. Hopfield, *Proc. Natl. Acad. Sci USA* 71, 4135 (1974).
- [3] J.J. Hopfield, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 79, 2554 (1982).
- [4] J.J. Hopfield, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 81, 3088 (1984).
- [5] E. Gardner, *J. Phys. A: Math. Gen.* 19 L1047 (1986).
- [6] D. Krotov and J.J. Hopfield. In *Advances in Neural Information Processing Systems* 29, 1172 (2016).
- [7] A. Engel and C. Van den Broeck, *Statistical Mechanics of Learning*. Cambridge: Cambridge University Press (2001).
- [8] S.E. Fahlman, G.E. Hinton and T.J. Sejnowski. In *Proceedings of the AAAI-83 conference*, pp. 109-113 (1983).
- [9] D.H. Ackley, G.E. Hinton and T.J. Sejnowski, *Cogn. Sci.* 9, 147 (1985).
- [10] P. Smolensky, *Parallel Distributed Process.* 1, 01 (1986).
- [11] G.E. Hinton, *Neural Comput.* 14, 1771 (2002).
- [12] C. Díaz-Faloh, *Diluting Restricted Boltzmann Machines*, Licentiate Thesis in Physics. Physics Faculty, University of Havana, Cuba (2024).
- [13] D.E. Rumelhart, G.E. Hinton, R.J. Williams, *Nature*, 323, 533 (1986).
- [14] G.E. Hinton, S. Osindero and Y.-W. The, *Neural Comput.* 18, 1527 (2006).
- [15] A. Krizhevsky, I. Sutskever, G.E. Hinton, *Communications of the ACM*, pages 84 (2017).
- [16] K. Hornik, *Neural Netw.* 4, 251 (1991).
- [17] J. Behler and M. Parrinello, *Phys. Rev. Lett.* 98, 146401 (2007).
- [18] G. Carleo and M. Troyer, *Science* 355, 602 (2017).
- [19] S. Rasp, M.S. Pritchard and P. Gentine, *Proc. Natl. Acad. Sci USA* 115, 9684 (2018).
- [20] C. Wong, *Nature* 628, 710 (2024).
- [21] ALEPH Collaborations, *Phys. Lett B* 447, 336 (1999).
- [22] ATLAS Collaboration, *Phys. Lett. B* 716, 1 (2012).
- [23] IceCube Collaboration, *Science* 380, 1338 (2023).
- [24] K.A. Pearson, L. Palafox and C.A. Griffith, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 474, 478 (2017).
- [25] EHT Collaboration, *ApJL* 930, L15 (2022).
- [26] R. Braun, A. Bonaldi, T. Bourke, E. Keane, J. Wagg 10.48550/arXiv.1912.12699. (2019).

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



OBSERVACIONES HISTÓRICAS Y RECIENTES DE COMETAS EN CUBA

HISTORICAL AND RECENT OBSERVATIONS OF COMETS IN CUBA

Y. CEBALLOS-IZQUIERDO^{a†}, N. A. GALLARDO-QUESADA^b, L. E. RAMOS-GUADALUPE^c

a) Biblioteca Digital Cubana de Geociencias, La Habana, Cuba; yasmaniceballos@gmail.com[†].

b) Instituto Pre-Universitario Urbano Luis Martínez Almaguer, Gibara, Holguín, Cuba.

c) Sociedad Meteorológica de Cuba, La Habana, Cuba.

[†] corresponding author

Recibido 2/8/2024; Aceptado 28/10/2024

Cuba tiene una larga tradición en la observación de cometas, que se remonta al siglo XIX, cuando figuras como José Joaquín de Ferrer registraron movimientos de cometas, incluido el cometa de 1807. Estos esfuerzos continuaron en el siglo XX, con eventos notables como la observación telescópica del cometa Halley en 1910 por el sacerdote jesuita Mariano Gutiérrez-Lanza. Sus observaciones contribuyeron a la ciencia cometaria y calmaron los temores públicos de una colisión entre el cometa y la Tierra. Hoy en día, astrónomos aficionados cubanos, utilizando herramientas digitales y redes sociales, continúan con este legado. Observaciones recientes de cometas reflejan la duradera pasión de Cuba por la astronomía y destacan su creciente interés en el tema.

Cuba has a long-standing tradition in comet observation, dating back to the 19th century when figures like José Joaquín de Ferrer recorded comet movements, including the 1807 comet. These efforts continued into the 20th century, with notable events such as the telescopic observation of Halley's Comet in 1910 by Jesuit priest Mariano Gutiérrez-Lanza. His observations contributed to cometary science and alleviated public fears of a collision between the comet and Earth. Today, Cuban amateur astronomers, using digital tools and social media, continue this legacy. Recent observations of comets reflect Cuba's enduring passion for astronomy and highlight its growing interest in this topic.

PACS: Atmosphere comets (cometas atmosféricos), *96.25.F-; atmospheric optics (óptica atmosférica), 42.68.-w; atmospheric meteorology (meteorología atmosférica), 92.60.hf; comets impact phenomena (fenómenos de impacto de cometas), 96.25.Pq.

Comets are ancient remnants from the early Solar System, formed over 4.6 billion years ago [1]. These ice-rich, kilometer-sized bodies, preserved at low temperatures, offer critical insights into the volatile materials present in the proto-solar disk and may have been key contributors to delivering water and organic compounds to early Earth [1,2]. As they approach the Sun, their volatile ices sublimate, releasing gases and dust into the surrounding coma, making comets not only fascinating subjects for scientific investigation but also essential to our understanding of planetary formation and evolution [2].

The observation of comets has long intrigued astronomers and skywatchers around the world, and Cuba holds a significant place in this history [3–10]. The island's geographical location made it an attractive point for astronomical observations, including those of comets, dating back to the 19th century [7]. Notable figures such as José Joaquín de Ferrer made important contributions with detailed recordings of cometary movements, such as the one seen in September 1807 [4, 5]. Ferrer's meticulous observations were highly regarded for their precision, contributing to both local and international understandings of cometary behavior. His work, carried out from Havana and other locations across the island, exemplifies the precision and dedication of early Cuban astronomers [3–10].

In 1825, a comet sighted from the island sparked a heated debate among some of the country's leading intellectuals,

including Ramón de la Sagra, José Antonio Saco, and José de la Luz y Caballero. The controversy, which blended scientific inquiry with philosophical debate, was later documented by Mesa Rodríguez in 1945 [11]. Throughout the 19th century, Cuba continued to play a role in comet observation, gaining international recognition for the quality of its records [8–10]. These historical observations not only contributed to our understanding of comet orbits but also connected Cuba to the wider astronomical community of the time [10].

In particular, one of the most notable events in the early 20th century was the telescopic observation of Halley's Comet on January 13, 1910. This marked the first time Halley's Comet was observed telescopically in Cuba, a feat accomplished by personnel at the Observatorio del Colegio de Belén [12,13]. Interestingly, there are also reports [14] of a telescopic observation of a comet from Santa Clara starting on January 20, 1910, which was no longer visible from Cuba by February 1. However, it is noted that this was not Halley's Comet [14].

The first person to observe Halley's Comet from Cuba was Jesuit priest Mariano Gutiérrez-Lanza. Using the telescope located at the ancient convent of Belén in Havana, Gutiérrez-Lanza identified the comet on January 13, 1910, from the coordinates: 1h. 40m. right ascension and +9° 53' declination, while it was still beyond Mars' orbit. His meticulous studies, presented to the Academy of Medical, Physical and Natural Sciences of Havana and published in their Annals [12], included a detailed description of the

comet's physical properties, its orbit, and a defense against public fears that Earth would be destroyed by a collision with Halley's comet or its tail gases. These early observations would serve as the foundation for a growing interest in studying the Halley's comet from Cuba in the following decades [15–17].

Two notable observation records from this period include the first perihelion observation of Comet Bester by amateur astronomer Roberto Ortiz in 1948, and the observation of Comet Ikeya-Seki in October 1965.

Recently, more concerted efforts have been made by Cuban institutions using more sophisticated equipment to observe comets, including a newly commissioned 20 cm wide-field robotic telescope [18–20]. This instrument serves as a multi-task tool for both astrometric and photometric research, with applications ranging from near-Earth and solar space tasks, such as monitoring space debris and small bodies in the Solar System, to deep-space astrophysical observations [18–20]. Although detailed public reports from these efforts are still limited, the deployment of this advanced technology highlights Cuba's growing commitment to continuing its legacy of comet observation, building on the foundational work of early astronomers like Ferrer and Gutiérrez-Lanza. These advancements signal a renewed investment in astronomical research, positioning Cuba as an active participant in tracking significant cometary and asteroid events.

One of the most remarkable aspects of modern comet observation in Cuba is the growing role of amateur astronomers. With the rise of social media platforms and affordable digital photography, enthusiasts have been able to make independent observations and share their findings with the broader public. Many have even built homemade telescopic equipment using accessible parts, combining these tools with open-source software to track and photograph comets. This inventive spirit has allowed amateur astronomers to contribute more to comet observation, while also enhancing public understanding of astronomy. This note examines both the historical records and contemporary comet observations, demonstrating how Cuba's astronomical legacy continues into the present. By exploring these efforts, we uncover Cuba's pivotal role in the broader context of cometary science, bridging the gap between past and present. Additionally, we hope the provided review serves as a foundation for future research endeavors.

In recent years, Cuban scientists and amateur astronomers have turned their attention to other notable cometary appearances. For example, in 2013, the comet PanSTARRS (C/2011 L4) passed close to the Moon and sparked interest among Cuban astronomers. These observations continued with the sighting of Comet C/2022 E3 (ZTF), Comet C/2023 P1 Nishimura, Comet 12P/Pons-Brooks, Comet NEOWISE (C/2020 F3) and the more recent appearance of Comet C/2023 A3 (Tsuchinshan-ATLAS), reflecting the enduring fascination with comets among astronomy enthusiasts in Cuba, leading to several organized observation efforts, primarily coordinated through local independent skywatchers.

The observations of Comet NEOWISE were particularly significant, as the comet's visibility in the Northern Hemisphere coincided with favorable weather conditions in Cuba. Amateur astronomers and photography enthusiasts, equipped with simpler observation tools, captured impressive images, and tracked the comet's trajectory across the night sky. This data, shared via social media (Fig. 1), contributed to a collaborative effort in documenting the comet's appearance from various regions across the island.

Similarly, preparations for the observation of Comet C/2023 A3 involved a small group of enthusiasts who closely monitored the event and shared their collected data, boosting public engagement in cometary science through social media. This convergence gained significant media attention, with scientific outreach platforms such as Juventud Técnica magazine featuring a photograph taken by amateur astronomer Jorge Félix Morales, as well as coverage by the Observatorio Científico. These efforts not only highlighted the growing role of amateur astronomers in Cuba but also underscored the island's increasing enthusiasm for astronomical events.

Although these recent initiatives may lack the advanced instruments of professional observatories, they offer valuable grassroots data that complements global comet studies and scientific outreach. The use of accessible digital tools for imaging and data sharing has enabled Cuban observers to engage in a worldwide dialogue on cometary science through publications in Facebook groups or personal profiles, thus preserving and continuing the island's long tradition of comet observation. The appearance of Comet NEOWISE (C/2020 F3), discovered by NASA's NEOWISE spacecraft on March 27, 2020, captivated observers globally due to its brightness and prominent tail [1,2]. Considered the brightest comet visible in the Northern Hemisphere since Hale-Bopp in 1997, it became a prominent naked-eye target during the summer of 2020, earning the nickname "The Great Comet of 2020" [2]. Its close passage near the Sun on July 3, 2020, caused its icy core to release dust and gas, forming spectacular tails visible to the naked eye under dark skies. Cuban amateur astronomers took full advantage of this celestial display, documenting it from various locations across the island, with reports of vivid views from cities like Havana and Matanzas, and rural areas with less light pollution.

C/2023 A3, also known as Tsuchinshan-ATLAS, is a retrograde long-period comet first discovered on January 9, 2023, by two independent survey teams: the Tsuchinshan Observatory in China and the ATLAS observatory based in Hawaii [21]. The comet reached perihelion on September 24, 2024, at a heliocentric distance of 0.391 AU, ahead of its closest approach to Earth on October 13, 2024 [21]. Expected to be one of the brightest comets visible in recent years, early reports from Cuba and other regions reflect growing anticipation for its close encounter in late 2024. Cuban astronomers, both amateur and professional, have already begun tracking its movement, contributing valuable observations as part of a larger international effort.

In recent observations from Gibara, one of the authors noted the increasing prominence of Comet C/2023 A3. On September

30, 2023, during its third day of visibility, the comet was captured with an apparent magnitude of 2.4, with reports of growing brightness from other Cuban locations (Fig. 2). It is projected to reach a magnitude of 0.7 by October 12, 2023, making it an exciting celestial event for skywatchers (Fig. 3-4).

To effectively observe comets, Cuban enthusiasts often seek out dark, rural locations that are free from city lights, minimizing light pollution; beaches and elevated spots provide excellent vantage points. While many comets, such as NEOWISE and C/2023 A3, can be viewed with the naked eye under ideal conditions, using binoculars or a telescope enhances the experience significantly. Photographers are advised to set their cameras to higher ISO settings and long exposure times, stabilizing them with a tripod to prevent blurring. For precise tracking, apps like SkySafari or Stellarium are useful tools. Additionally, observers should allow their eyes time to adjust to the darkness, steering clear of bright lights to enhance their night vision.

The vibrant enthusiasm among Cuban observers, exemplified by the recent sightings of NEOWISE and C/2023 A3, showcases the island's contribution to global cometary science. With the upcoming maximum approach of C/2023 A3, Cuban astronomers are expected to continue this legacy, capturing the event and contributing valuable data. The synergy of historical insights and modern observations ensures that the fascination with comets remains a cornerstone of Cuba's astronomical community, inspiring future generations to look to the stars.

REFERENCES

- [1] J. Boissier, N. Biver, D. Bockelée-Morvan, J. Crovisier, H. Cottin, M. A. Cordiner, and R. Moreno, *LPI Contrib.* **2851**, 2133 (2023).
- [2] M. N. Drozdovskaya, D. Bockelée-Morvan, J. Crovisier, B. A. McGuire, N. Biver, S. B. Charnley, and A. J. Remijan, *Astron. Astrophys.* **677**, A157 (2023).
- [3] J. J. de Ferrer, *Trans. Am. Philos. Soc.* **6**, 345 (1809).
- [4] J. J. de Ferrer, *Mem. R. Astron. Soc.* **3**, 1 (1827).
- [5] J. J. de Ferrer, *Mem. R. Astron. Soc.* **3**, 10 (1827).
- [6] O. Gutiérrez, *Rev. Soc. Esp. Hist. Cienc. Técn.* **38**, 291 (2015).
- [7] J. J. de Ferrer, *Mem. R. Astron. Soc.* **3**, 6 (1827).
- [8] A. Poey, *Comptes Rendus Acad. Sci.* **48**, 726 (1859).
- [9] A. Poey, *Comptes Rendus Acad. Sci.* **53**, 124 (1861).
- [10] W. T. Lynn, *The Observatory* **21**, 242 (1898).
- [11] M. Mesa Rodríguez, *Bol. Obs. Nac.* **1**, 2 (1945).
- [12] M. Gutiérrez Lanza, *Acad. Cienc. Méd. Fís. Nat. Habana*, Feb 26, 1910.
- [13] J. A. Rodríguez García, *Papeles nuevos, Impr. "Cuba Intelectual"*, 1916, p. 197.
- [14] J. Jover Anido, *Acad. Cienc. Méd. Fís. Nat. Habana, Santa Clara*, Feb. 10, 1910.
- [15] J. P. Doval, E. G. Zhilinskij, A. P. Kulish, O. V. Nikonov, M. A. Sid, S. V. Tolbin, and F. Farinas, *Izv. Glav. Astron. Obs. Pulkovo* **205**, 69 (1988).
- [16] O. V. Nikonov, M. A. Pogodin, L. M. Kotliar, S. V. Tolbin, and R. Farinas, *Astron. Vestn.* **23**, 324 (1989).

- [17] O. V. Nikonov, M. A. Pogodin, and R. Farinas, *Izv. Glav. Astron. Obs. Pulkovo* **206**, 68 (1989).
- [18] D. V. Bisikalo, I. S. Savanov, S. A. Naroenkov, M. A. Nalivkin, A. S. Shugarov, N. S. Bakhtigaraev, and M. G. Garcia, *Astron. Rep.* **62**, 367 (2018).
- [19] M. Ibrahimov, D. Bisikalo, A. Fateeva, R. Mata, and O. Pons, *Contrib. Astron. Obs. Skalnaté Pleso* **51**, 280 (2021).
- [20] D. V. Bisikalo, M. E. Sachkov, M. A. Ibrahimov, I. S. Savanov, M. A. Nalivkin, S. A. Naroenkov, and M. R. Rodriguez Uratsuka, *Astron. Rep.* **66**, 38 (2022).
- [21] S. R. Grant and G. H. Jones, *Res. Notes AAS* **8**, 252 (2024).



Figure 1. Comet NEOWISE in the Havana sky, seen from a rooftop on July 21, 2020 (Photo credit: Hector Garrido).



Figure 2. The comet C/2023 A3 (Tsuchinshan-ATLAS) at dawn on September 30, 2024, observed from Gibara, Cuba, with a magnitude of 2.4 at the time.



Figure 3. Comet C/2023 A3 (Tsuchinshan-ATLAS), observed from Gibara, Cuba, at sunset facing west. It was clearly visible to the naked eye, including its tail, in a light-pollution-free setting once eyes adjusted to the darkness.



Figure 4. Comet C/2023 A3 (Tsuchinshan-ATLAS), which continues to move away and gradually loses brightness. October 22, 2024. Details: ISO 6400, 20 s, f/3.5, 18 mm, Canon EOS Rebel T3i.

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



INSTRUIR TALENTOS EN LA FÍSICA: UN RETO

INSTRUCTING TALENT STUDENTS IN PHYSICS: A CHALLENGE

L. D. FERNÁNDEZ-QUINTANA^{a†}, F. R. MARTÍNEZ-SÁNCHEZ^b

a) Departamento de Física, Universidad de Oriente, Santiago de Cuba, Cuba. luis.fernandezq@uo.edu.cu[†]

b) Departamento de Física, Universidad de Oriente, Santiago de Cuba, Cuba. martinez@uo.edu.cu[†]

[†] corresponding author

Recibido 2/8/2024; Aceptado 28/10/2024

La enseñanza de la Física en Cuba está en uno de sus peores momentos después de los años 1960's, al menos al nivel preuniversitario. En este artículo, subrayamos la importancia de atender a los estudiantes que muestran talento para esta asignatura en ese nivel educacional. En especial, proponemos algunas ideas de muy poco costo económico que podrían contribuir al mejor desempeño de estos estudiantes, pero también de todos los jóvenes con una inclinación vocacional hacia la Física y ciencias afines en Cuba.

The teaching of Physics in Cuba is in one of its worst moments since the 1960s, at least at the pre-university level. In this article, we highlight the importance of serving students who show talent for this subject at that educational level. In particular, we propose some ideas of very little economic cost that could contribute to the better performance of these students, but also of all young people with a vocational inclination towards Physics and related sciences in Cuba.

PACS: Physics Education (educación de la Física), 01.40.-d; Educational aids (objetivos educacionales), 01.50.-i; Teacher training (entrenamiento de profesores), 01.40.-J; Physics Tournament (torneos de Física), 01.50.Rt

Como se declara en la sección "Coordenadas" de este mismo número de la Revista Cubana de Física, queda claro que la enseñanza de la Física en Cuba está muy lejos de su mejor momento, especialmente en los niveles previos a la educación superior. Ante todo, para juzgar en cuanto al estado de la enseñanza de la Física en Cuba, debe darse un vistazo a la bibliografía que se está usando, dígame desde octavo hasta el duodécimo grados acogidos en las Enseñanzas Media y Media Superior. ¿Cuánto ha cambiado esta? Basta con percibir el decremento en el grosor de estos libros al pasar de los años y, como si no fuese suficiente, la cantidad de capítulos que en ellos se obvian. ¿Se utiliza bibliografía complementaria y actualizada? ¿Han quedado plasmados en esta al menos los hitos del primer decenio del actual siglo y sus explicaciones más populares? ¿Han sido perfeccionados los métodos de enseñanza o solo han quedado expuestos en las diversas tesis de graduación y artículos pedagógicos? ¿La Matemática es abordada con solidez durante las clases de Física o es apartada cual elemento antisocial? ¿Y las prácticas de laboratorio? ¿Ha quedado plasmado el papel de la Física como base de otras ciencias?

La introducción de esta ciencia parte simplemente de la observación: de nada vale abogar por conceptos científicos si no se ha observado e interpretado el fenómeno en cuestión. En muchos centros, se suelen dictar las definiciones y conceptualizaciones de magnitudes físicas y hechos, en ese orden, sin dar espacio al debate o dar cabida a la duda. Siguiendo el proceso, la ejemplificación es expresada a través de ejercicios que relacionan dos o tres magnitudes físicas por medio de una de las definiciones principales.

Sin embargo, aquí es donde comienza a desacelerar el proceso formativo de los estudiantes, ya que este nivel no se supera. El típico proceso reproductivo con altas tasas de repetitividad,

más conocido como enseñanza memorística, se adueña de las clases prácticas bajo un enfoque usual cuya única pretensión es la solución numérica del "problema".

De acuerdo con Lerman [1], "... los números en sí mismos no interesan a los estudiantes, no pueden ser la expectativa o motivación de estos últimos para resolver un problema". Además, como tal no se llega a analizar problemas, puesto que ya se conocen los medios o caminos evidentes para obtener la solución [2]. Así, se aniquila el pensamiento creativo, se daña la capacidad de análisis y hay un alto grado de disociación con las asignaturas que en paralelo se imparten. En cuanto al experimento, se ejecutan (unas más que otras) prácticas demostrativas, pero nada de teoría de incertidumbres y existe baja participación o desenvolvimiento de los escolares. Sumado a todo lo anterior, la carencia de personal docente, los errores acumulados desde enseñanzas precedentes, la deficiente actitud ante el estudio, el bajo nivel de preparación de algunos educadores, el deficiente control de los procesos y planes de acción, la situación energética y económica del país, entre otros factores, pueden ser elementos que generen desmotivación, intolerancia y desinterés por la asignatura en cuestión y otras ciencias.

Una vez que en medio de todo este escenario se detectan casos puntuales de alumnos sobresalientes o talentos, comienza la inserción de estos en las diferentes instancias de entrenamiento para Concursos u Olimpiadas Nacionales. A pesar de su notable nivel respecto a los demás, estos estudiantes también arrastran vacíos y errores en su base de conocimientos, por lo que hay que acceder a ella por medio de diagnósticos y corregir lo antes posible. Si el paso anterior se viola, no serán totalmente efectivos los procesos subsiguientes. La primera impresión es cuando reciben la teoría, generalmente conocen elementos básicos hasta que

se les muestran situaciones diferentes en las cuales las formulaciones se vuelven más generales. Por tanto, se sugiere la derivación de casos particulares y conocidos para demostrar la concordancia y unidad de la física. El otro gran desafío es la resolución de problemas que, de acuerdo con Bútikov, Bíkov & Kondrátiev [3], “se parece a una pequeña investigación; lo mismo que en una investigación científica real no siempre es evidente de antemano cuál debe ser la secuencia de las operaciones necesarias para obtener el resultado, en este sentido, no hay recetas universales; la destreza necesaria solo se alcanza trabajando con ahínco a medida que se acumulan los conocimientos.”

Los concursantes inicialmente sienten un alto grado de frustración debido a que carecen de la experiencia y habilidad para resolver situaciones problemáticas nuevas. Este es el momento que definirá su posterior desarrollo y que los sacará de la rutina de su comunidad estudiantil: deben decidir entre estudiar más y eficientemente o seguir a favor de la corriente, de modo que necesitan del apoyo de entrenadores y familiares para evitar el desfallecimiento y la desmotivación. Se sugiere el estudio de las soluciones como primer elemento para comprender las vías de resolución. Esto último es muy importante: deben mostrarse las diferentes variantes de solución que se tengan a mano e incitar a la creación de otras posibles. En ciertos momentos es bueno que se abogue por la discusión en conjunto, así se crea un ambiente más allá del competitivo que favorece el crecimiento personal y las probabilidades de éxito en los diversos niveles. Generalmente, cada alumno desarrolla su propio método de estudio, pero siempre es bueno aconsejar. Por ejemplo, algunos se esfuerzan estudiando y no ven resultados, muchas veces debido a que no descansan, no tienen momentos de cambio de actividad o relajación.

La calificación de los exámenes es otro aspecto que puede afectar la estabilidad del alumno: la rigidez de las claves y la omisión de diferentes caminos atenta contra la creatividad y desarrollo cognitivo e, incluso, hiera la autoestima del estudiante. Si no se flexibiliza el calificador, no lo hará la clave y se seguirán perdiendo talentos. El velar por la correcta calificación es esencial, no debe permitirse fraude de ningún tipo. De modo que, la preparación metodológica de los profesores es vital, así como el aseguramiento de las nuevas generaciones de maestros con el nivel demandado. Ejemplo de esto ha sido el Proyecto PEAFF desarrollado por las universidades de La Habana y la de Oriente. Paralelamente al cubrimiento de las necesidades de estos alumnos aventajados, el curso escolar normal continúa: actualmente, con el acortamiento de los meses educacionales, se han reducido los contenidos pero, a la vez, se ha disparado el número de orientaciones de trabajos extraclases, lo que presiona y entorpece en ocasiones el desempeño de este

grupo estudiantil. Los argumentos, la ignorancia y actitudes de algunos profesores que están fuera del ámbito competitivo, suelen también lastimar y desmotivar. Aquel alumnado que no venza el transcurso de las etapas de concurso, no debe descuidarse: forma parte de la cantera y merece atención, pues puede ser un grupo exitoso en el próximo año. Una fortaleza en todo este proceso es que existe la preocupación y ocupación de las entidades educacionales, principalmente los Institutos Preuniversitarios Vocacionales de Ciencias Exactas (IPVCEs), en los que radican los Centros Provinciales de Entrenamiento, de poner al día en las demás asignaturas a los concursantes luego de la etapa de intensivo y competencia.

La creación de una plataforma web de fácil acceso desde la Intranet libre de costo, que contenga una base de datos de todas las olimpiadas pasadas, talleres y bibliografía orientada a abordar los elementos teóricos y la resolución de problemas, sería ideal para que el conocimiento se expanda y produzca un auge en el estudio de las ciencias en general. De esta forma se palea el regionalismo, la centralización del conocimiento, se eleva el nivel del país en la materia y se descubren nuevos talentos. Otra propuesta sería la fundación de un canal de Youtube, aunque alternativamente pudiese usarse Picta (<https://www.picta.cu>), en el cual se brinden explicaciones a los problemas más complejos, se informe acerca de los distintos eventos competitivos regionales e incluso se motive a la participación en eventos online internacionales como Physics Brawl (<https://physicsbrawl.org/>), Olimpiada Online de Física (<https://www.dea-peru.pe/>), Physics Cup (<https://physicscup.ee/>), Rudolf Ortway Competition (<https://ortway.elte.hu/main.html>), OPhO (<https://opho.physoly.tech/>) etc. El diseño de una revista dedicada especialmente a la enseñanza de la Física y la Matemática, con temas cotidianos, tal y como muestra la mensual rusa KBAHT (<http://kvant.mccme.ru/>), podría tener un gran impacto.

En conclusión, podemos decir que, dentro del difícil escenario en que se desarrolla la enseñanza de la Física en Cuba a todos los niveles, una inversión de tiempo y algunos recursos muy limitados permitirían “salvar” a estudiantes especialmente talentosos, que pueden constituir la base de la investigación científica en el terreno de la Física en un futuro.

REFERENCES

- [1] N. Lerman. Am. J. Phys. 32, pp. 927. (1964).
- [2] S. Krulik y K. Rudnik. Problem solving in school mathematics. (National council of teachers of mathematics. Reston, Virginia, 1980)
- [3] E. Bútikov; A. Bíkov y A Kondrátiev. Física en ejemplos y problemas. (Moscú, URSS, 1991).

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



A STORMY ENCOUNTER BETWEEN PHYSICS AND BIOLOGY



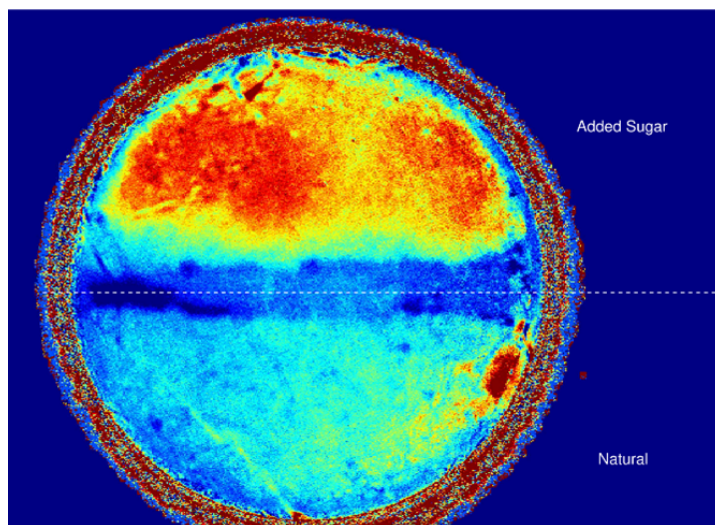
Group picture of the “Hands-On Quantitative Biology School” (Havana, Cuba, 4-15 nov. 2024). (Photo: courtesy of J. Grilli).

On a summer night in the 1930s, physicist Max Delbrück and biologist Salvatore Luria were enjoying a cold beer in Rome. Luria explained to Delbrück the most controversial debate of the time in evolutionary biology: Are mutations spontaneous—as theorized by Darwin—or do they occur in response to stress? Delbrück became interested in the question, and the two designed an ingeniously simple experiment to test whether mutations occurred spontaneously or not. The experiment was finally performed in 1943. Darwin was right, and the two received the Nobel Prize in 1969 for that work. This remarkable result came from the collaboration between a biologist and a physicist.

The Hands-on School in Quantitative Biology, organized by ICTP, ICGEB, and the University of Havana, aimed to expose students with different backgrounds to the same creative and interdisciplinary environment that led to the collaboration and discovery of Luria and Delbrück. The students (20 from Cuba and 10 from Latin America and Africa) and lecturers (from Cuba, Italy, Brazil, and the United States) gathered together on Monday, November 4, at the Faculty of Physics, University of Havana. In the original plans, three days of lectures would be followed by experiments performed by students. However, hurricane Rafael forced changes to the plans, requiring adaptation to the unexpected, challenging conditions.

Thanks to the hard work of the lecturers, the local organizers (Prof. Roberto Mulet and Prof. Ernesto Altshuler), and the enthusiasm of the students, the lectures resumed during the weekend, and by Monday, November 11, the lab and field work began. The students were divided into groups to perform different experiments, also in collaboration with the faculty of Biology, University of Havana. One group used yeast to repeat the experiment originally performed by Luria and Delbrück. Two other groups worked on the properties of bacterial growth: how they interact, how they move, how they consume oxygen (see figure) and how they change the

environment. Another group studied how a biofluid travels in the free space and inside a human nasal cavity model. Finally, one group worked on bioacoustics, analyzing the sound of Cuban frogs. The students—half biologists and half physicists—worked on these experiments from Monday to Thursday, and presented their results on Friday November 15th, 2024. The organization and logistics of the school were very challenging due to electricity blackouts, hurricane Rafael, and the need of coordination between different departments. Thanks to the collaboration between faculties and institutions, and the effort of all people involved, the school was a great success. Students learned how to collaborate hand in hand across disciplines and directly experienced how the quantitative approach of physics allows for asking and answering deep questions in life sciences.



Fluorescence image of an oxygen reporter in contact with sediment taken from the “Almendares” river (Havana). Warmer colors show where oxygen is consumed the fastest by microorganisms. Cooler colors show locations where the consumption is relatively slow. Sugar was added to the top half of the sample, which led to faster consumption of oxygen. The radius of the circle is 2.5 cm. (Image: courtesy of Alexander Petroff).

The integration of physical, mathematical, and life sciences has proven to be a very successful avenue for deepening our understanding of biological systems. This was true in the time of Luria and Delbrück, and it is even truer today. Exposing students to the power and challenges of interdisciplinary collaborations at an early stage of their careers will contribute to creating a new generation of scientists capable of asking and answering novel, big questions in both physics and life sciences.

Jacopo Grilli

“Abdus Salam” ICTP

UN ADIÓS A ARMANDO PÉREZ-PERDOMO DESDE EL AULA MAGNA



El profesor Julio Vidal se dirige a los asistentes durante el acto recordatorio del recientemente fallecido profesor Armando Pérez-Perdomo en el Aula Magna de la Universidad de La Habana, el 18 de noviembre de 2024 (Foto: E. Altschuler).

El lunes 18 de noviembre de 2024, a las 2:00 pm en el Aula Magna de la Universidad de La Habana, un nutrido grupo de amigos, vecinos, compañeros de trabajo y alumnos de varias generaciones del ilustre, querido, distinguido e inolvidable profesor, decano y rector Armando Pérez Perdomo, se dio cita para acompañar en homenaje póstumo a su hija y su hijo.

El solemne acto comenzó con el himno nacional cantado a viva voz por los presentes y contó con la presencia distinguida de la rectora de esta casa de altos estudios, Dra. Miriam Nicado García y la decana de la Facultad de Física, Dra. Aimé Peláez Barranco. Las palabras centrales del homenaje póstumo estuvieron a cargo del Dr. Carlos Rodríguez Castellanos. A quien siguieron con emotivas palabras Rubén Álvarez Brito,

Félix Martínez Oliva, Teresa Molina Molina, Lourdes Arenas, Aimé Peláez Barranco y Julio Vidal Larramendi, en ese orden.

Los oradores narraron con profundo respeto y palabras salidas de lo más hondo del corazón, vivencias personales que los marcaron para siempre, con la huella indeleble que solamente dejan a su paso por la vida seres extraordinarios como Armando Pérez Perdomo.

La sentida ceremonia concluyó con un resonante y prolongado aplauso del auditorio puesto de pie en memoria del gran hombre que fue Armando Pérez Perdomo.

El lugar para tan sentida y solemne ceremonia no pudo ser mejor escogido. Más allá del influjo de la fotografía del Armando Pérez Perdomo conocido por todos los presentes, de documentos que constituyen valiosos testimonios de su relevante vida y obra, de las numerosas condecoraciones que recibió en vida, y de las que no recibió por haber sido reacio a reconocimientos de sus bien ganados méritos; durante todo el acto, en el recinto universitario que muchas veces contó con su protagónica presencia, cada quien recordaba sus propias vivencias con Armando Pérez Perdomo y sentía que estaba allí, convocado por alguien que hasta su último aliento fue fiel ejemplo de modestia, de consagración a la causa del pueblo cubano, digno heredero y continuador de la obra y del ideario patriótico de quien descansa allí, a pocos pasos, en el cenotafio que fue colocado en ese mismo recinto universitario un 19 de noviembre, con una inscripción cuyas últimas palabras son: "en memoria de tan gran hombre".

Edwin Pedrero

Universidad de la Habana

CELEBRADA X ASAMBLEA DE LA FEIASOFI



Foto de grupo de la Asamblea de la FEIASOFI. De izquierda a derecha, arriba: Arturo Martí (Uruguay), Rodrigo Barbosa (Brasil), Paul Sánchez (Ecuador), Nabil Kawas (Honduras) y Ricardo Faccio (Uruguay). Debajo: Leopoldo Soto (Chile), María Sánchez (Cuba), Omar Osenda (Argentina) y Luis Viña (España) (Foto: M. Sánchez-Colina)

Los días 16 y 17 de septiembre de 2024, en la Universidad Nacional de San Luis, Argentina, se realizó la X Asamblea General de la Federación Iberoamericana de Sociedades de

Física (FEIASOFI). La Asamblea tuvo lugar en el marco del 80 aniversario de la Asociación Física Argentina (AFA).

En la reunión participaron representantes de las asociaciones de Física de: Argentina, Brasil, Cuba, Chile, Ecuador, España, Honduras, Portugal, Uruguay y Venezuela. Como invitados participaron: la Dra. Ana Maria Cetto, del Instituto de Física de la UNAM, la Dra. Young-Kee Kim, presidente de la Sociedad Americana de Física (APS), el Dr. Luis Felipe Rodríguez, director del Centro Mesoamericano de Física Teórica (MCTP) de México, David McDade, director editorial de IoP y la Dra. Silvina Ponce Dawson, presidente de la Unión Internacional de Física Pura y Aplicada (IUPAP).

Los participantes debatieron la necesidad de crear una agencia para el financiamiento de la ciencia en América Latina (AL), para lo que se sugirió apelar a iniciativas desarrolladas en los últimos años como el foro de rectores de AL y el Espacio Latinoamericano y Caribeño de Educación Superior (ENLACES). Se señaló también la necesidad de aumentar el intercambio científico entre nuestros países para lo que, el Dr. Rodrigo Barbosa Capaz, director del Laboratorio Nacional de Nanotecnología (LNNano) en Brasil y el Dr. Luis Felipe

Rodríguez, director del Centro Mesoamericano de Física Teórica (MCTP) de México, expusieron las facilidades y programas disponibles para el intercambio de investigadores y estudiantes de posgrado de la región en estos centros.

Se decidió aumentar el apoyo de FEIASOFI a la Olimpiada Iberoamericana de Física (OIbF) y, además de continuar financiando su sitio web, costear en lo adelante la fabricación de las medallas. Especial atención mereció la designación de 2025 como año de la ciencia y tecnologías cuánticas. La Dra. Ana Maria Cetto, líder de esta propuesta ante UNESCO, hizo una presentación sobre la designación señalando el reconocimiento y oportunidades que esto representa para la comunidad científica internacional, en especial para los físicos. En este sentido, la asamblea acordó convocar un concurso de videos, realizar un evento con participación de todas las asociaciones miembros de FEIASOFI en el día

internacional de la cuántica (14/4/2025) y preparar un número especial de la Revista Brasileña de Enseñanza de la Física sobre el desarrollo de la Mecánica Cuántica en AL.

Por último, se eligió la junta directiva para el periodo 2025-2026, que quedó integrada por el Dr. Omar Osenda de Argentina como presidente, el Dr. Leopoldo Soto Norabuena de Chile como vicepresidente y el Dr. Luis Viña de España como tesorero. Como vocales fueron electos el Dr. Rodrigo Barbosa Capaz, de Brasil, el Dr. José António Paixão, de Portugal y la Dra. Sofía Fabrè, de Uruguay. Se reconoció el trabajo realizado por la directiva actual y se despidió a los colegas que dejan de integrarla.

María Sánchez-Colina

Universidad de la Habana

CUBA PARTICIPA EN LAS OLIMPIADAS MUNDIALES DE FÍSICA Y DE ASTRONOMÍA 2024



Compitiendo en Física en 2024. Panel superior: Entrenando para la Olimpiada Internacional de Física (IPHiO). Panel del centro: durante la realización online de la Olimpiada Internacional Científica de Física (ISPhIO 2024). Panel inferior: El team de la Olimpiada Mundial Abierta de Astronomía (OWAO). (Foto: S. Larramendi)

Entre el 15 y el 22 de Septiembre del año en curso, Cuba participó por segunda vez en la Open Word Astronomy Olympiad (OWAO 2024), esta vez con el equipo formado

por Massiel de la Fe, Maria Claudia Argote (estudiantes de primer año de la Facultad de Física de la Universidad de la Habana), Adonais Toscano (estudiante del primer año de la Facultad de Química de la Universidad de La Habana), mientras del Colegio Universitario formaron el equipo Liz Diana Huerta y Gabriel Biart. Este año los resultados vuelven a ser significativos: Maria Claudia repite su participación del 2023 con una Mención Honorífica, al igual que Gabriel, mientras que Liz Diana logró una Medalla de Bronce. La OWAO es una Olimpiada de Astronomía que organiza la Federación Rusa por encargo del Ministerio de Educación de Rusia, en el Territorio Federal de Sirius, en las proximidades de las Montañas del Cáucaso. En aquel lugar ha sido creado un centro para formar y desarrollar jóvenes talentos para la ciencia. El entrenamiento para participar en la Olimpiada transcurrió durante todo el mes de agosto, y el equipo de profesores que lo tuvo a su cargo estuvo conformado por Alejandro Jiménez Pérez, especialista de la Academia de Ciencias de Cuba y Saúl Larramendi Valdés, de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana, líderes del Equipo cubano junto con Alejandro Pellicer, quien obtuvo medalla de plata el pasado año y participó en la olimpiada recién finalizada como observador científico. Cuba estuvo presente en la OWAO 2024 en la modalidad On Line, desde la Facultad de Física de la Universidad de La Habana. En la OWAO 2024 participaron equipos de 21 países; del área latinoamericana estuvieron presentes Perú, Venezuela y Nicaragua.

Entre el 4 y el 11 de Julio tuvo lugar la tercera edición de la International Scientific Physics Olympiad (ISPhIO 2024) organizada por el Instituto de Física y Tecnología de Moscú, esta vez en la Ciudad de Khanty-Mansyisk, en la Federación de Rusa. Esta es una Olimpiada dirigida a jóvenes de hasta 20 años de edad que no hayan matriculado estudios superiores. Cuba participó en la modalidad On Line con los estudiantes de preuniversitario: Carlos Daniel Chaviano González y Josué Pablo Tornet, que lograron terceros lugares en la competencia especial "Teoría y Modelación". También formaron el equipo cubano Roimer Capote Brizuela, Sergio Danel Santiesteban y Rosmary Fernández Tamayo, quienes

lograron Menciones Honorables en la misma competencia especial. La ISPhIO es una competencia diferente entre las Olimpiadas de Física que tienen lugar en el planeta destinada a los jóvenes promesas para el trabajo científico, al abordar temas referidos a aplicaciones de punta de la Física en tecnologías y otras ciencias. Por el carácter de los temas, las herramientas experimentales y de cálculo matemático que se emplean, se requiere de una preparación especial y superior de los jóvenes. En el entrenamiento, que tuvo lugar en la Facultad de Física de la Universidad de la Habana, participaron sus profesores Reynaldo Font, Julio Cesar Drake y Saúl Larramendi V.

Entre el 22 y 29 de julio tuvo lugar la 54 Olimpiada Internacional de Física para jóvenes de hasta 20 años de edad y que no hayan ingresado a estudios superiores de ciencias y tecnologías. Cuba asistió a la Olimpiada, que tuvo lugar en la Universidad de Isfahan, milenario e importante centro cultural de la República Islámica de Irán, con los estudiantes de preuniversitario Carlos Chaviano González y Josué Pablo Tornet. El entrenamiento final de los estudiantes ocurrió en la Facultad de Física de la Universidad de La Habana. La participación de Cuba en

la 54 IPhIO cerró el ciclo de competencias y concursos de Física del 2024 en el país, que fue conducido este año desde la Facultad de Física de la Universidad de La Habana. La participación de Cuba en la olimpiada iraní marca su regreso a estas competencias; la última vez que se asistió fue a la Olimpiada de Portugal en el 2018. En los últimos años las IPhIO han escalado su nivel y rigor, incorporando a sus Syllabus elementos de cálculo superior mientras que los problemas experimentales han comenzado a incorporar recursos de alta tecnología para la adquisición y procesamiento de datos. Los estudiantes participantes quedaron muy cerca de lograr Mención Honorífica tras una muy intensa y dedicada preparación y auto-preparación. Como parte de las competencias internacionales de este año, el equipo de estudiantes cubanos participó en la Olimpiada Mesoamericana y del Caribe en modalidad online, donde Carlos Chaviano González obtuvo una Mención Honorífica, al igual que la estudiante Rosmary Fernández, que asistió a la Olimpiada Centroamericana y del Caribe en El Salvador.

Saúl Larramendi V

Universidad de la Habana

SILVINA PONCE DAWSON NUEVA PRESIDENTA DE LA IUPAP

La Unión Internacional de Física pura y aplicada, IUPAP eligió a la Dra. Silvina Ponce Dawson como su nueva Presidenta para el periodo 2024-2027. La elección se efectuó en la 33^a Asamblea General de esta organización llevada a cabo del 10 al 14 de octubre en Hainan, China. La nueva presidenta tomará posesión de su cargo el 1 de enero de 2025. Silvina Ponce Dawson, será la primera científica de Latinoamérica y la segunda mujer en la historia que presida esa organización.



un honor increíble para mí ocupar este cargo y estoy muy agradecida a todos los que han depositado su confianza en mí. Haré todo lo que esté en mi mano para cumplir sus expectativas y los invito a todos a navegar juntos". Además, dijo sentirlo como un enorme desafío y como la posibilidad de llevar adelante políticas interesantes en relación con Latinoamérica y los países en vías de desarrollo.

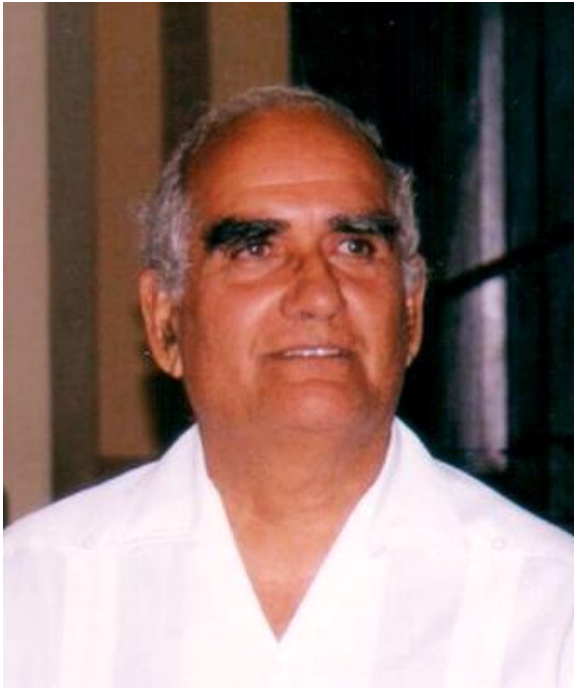
Silvina Ponce Dawson es una física argentina especializada en biofísica y física estadística, profesora titular en la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad de Buenos Aires (UBA) e Investigadora Superior del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas (CONICET). Es investigadora asociada en el Centro Internacional de Física Teórica (ICTP) de Trieste, Italia. Miembro Asociado del ICTP-SAIFR, Sao Paulo, Brasil. Editora asociada divisional de Physical Review Letters y editora asociada de la Junta Editorial de Frontiers in Biofísica. Fue miembro del Consejo Asesor del Programa Nacional para la Igualdad de Género del Ministerio de Ciencia de Argentina. Fue Directora (2005-2009) de la Facultad de Física de la UBA.

María Sánchez-Colina

Universidad de la Habana

Sobre este nombramiento a nueva presidenta expresó: "Es

UN FÍSICO ÍNTEGRO, E INTEGRAL



Armando Pérez-Perdomo (20 de septiembre de 1940 – 21 de septiembre de 2024)

El pasado 21 de septiembre falleció en La Habana, a la edad de 84 años, el destacado Profesor Titular de la Facultad de Física M. C. Armando Pérez Perdomo, de larga y brillante trayectoria al servicio de la educación superior cubana durante más de cincuenta años, quien fuera Rector de la Universidad de La Habana entre 1990 y 1994.

Armando Pérez Perdomo había nacido en La Habana el 20 de septiembre de 1940, en el seno de la familia del militante revolucionario Armando Pérez Pintó, un destacado combatiente del Directorio Revolucionario que participó en el asalto al palacio presidencial el 13 de marzo de 1957. Comenzó su trayectoria laboral a la edad de 12 años, sustituyendo al padre, ya clandestino, como cobrador de la Quinta Dependientes, y concluyó la segunda enseñanza en la Academia Valmaña, de Santos Suárez. En 1961, estando en Moscú con sus padres, funcionarios de la embajada de Cuba en la URSS, se incorporó al contingente de estudiantes cubanos que cursaban estudios universitarios en ese país. Se graduó como físico en la Universidad de Amistad con los Pueblos "Patricio Lumumba" en 1967. Allí también conoció y contrajo matrimonio con Irina Beloborodova, su compañera de toda la vida, futura profesora de nuestra universidad, con quien formó una familia y tuvo dos hijos: Armando (1968) y Anna (1975).

Concluidos sus estudios, se incorporó el 21 de septiembre de 1967 a trabajar como profesor a la entonces Escuela de Física de la Universidad de La Habana, fundada por la Reforma Universitaria de 1962, que aún se encontraba en etapa de consolidación. Integró aquel grupo de jóvenes brillantes que

irrupieron en el incipiente claustro, asumieron múltiples responsabilidades docentes y transformaron radicalmente la joven Escuela, aportando los conocimientos y la visión adquirida durante su formación, junto a su entusiasmo, capacidad, compromiso social y energía. Después de un corto período de intenso trabajo, donde mostró sus cualidades de organizador y alto sentido de la responsabilidad, fue reconocido como trabajador ejemplar y seleccionado para ocupar la responsabilidad de Vicedecano Docente de la Facultad de Ciencias. Ingresó al Partido Comunista de Cuba en 1970.

En la Facultad de Ciencias, integrada entonces por las escuelas de Matemática, Física, Química, Biología, Geografía, Farmacia y Psicología, realizó una importante contribución a la organización y consolidación de las carreras que allí se desarrollaban y al surgimiento de otras nuevas. Por su destacado trabajo fue promovido en 1974 a Decano. Después de la reestructuración de la Universidad de La Habana en 1976, ocupó las responsabilidades de Vicerrector Docente (1977-79) y Vicerrector Primero (1979-1987) donde también realizó un trabajo muy relevante. Poco a poco adquirió un conocimiento detallado de la universidad y de todas las esferas del trabajo de la educación superior, así como una sólida reputación de dirigente serio, modesto, sencillo, austero, de pocas palabras y probada eficiencia. En 1987 fue designado Director de Inspecciones del Ministerio de Educación Superior y en 1990 Rector de la Universidad de La Habana.

Armando Pérez Perdomo tuvo la difícil responsabilidad de dirigir la Universidad de La Habana entre 1990 y 1994. Encabezó los heroicos esfuerzos de los trabajadores y estudiantes universitarios para enfrentar las complejas condiciones del llamado Período Especial, mantener la universidad activa y contribuir al sostenimiento económico de toda la educación superior cubana. Bajo su dirección se alcanzaron importantes logros en el trabajo docente y científico, la educación de posgrado y la reestructuración de la cooperación internacional, respondiendo a la orientación de Fidel para transformar las universidades en centros de investigaciones al servicio del país. La comunidad universitaria de entonces lo recuerda como un Rector muy trabajador, que virtualmente abría y cerraba la universidad; un rector íntegro e integral, que daba clases, hacía guardias, participaba en el trabajo voluntario, practicaba deportes y almorzaba en el comedor universitario. Un Rector humilde, ejemplar, que gozaba de gran respeto y autoridad moral.

¡Y también un excelente ex Rector!

Concluida su misión de Rector, se mantuvo como miembro del Comité Provincial del Partido hasta 1998 y al frente de la Comisión de Educación de la Asamblea Provincial del Poder Popular, hasta finalizar su mandato como delegado. Por esta labor recibió la condición de Hijo Ilustre de la Ciudad de La

Habana, entre otros reconocimientos.

Desde 1994 se reincorporó al trabajo como profesor de Óptica y Electromagnetismo en el departamento de Física General de la Facultad de Física. Fundador junto a otros compañeros del Taller Iberoamericano de Enseñanza de la Física, participó en todos sus congresos como miembro del Comité Científico y contribuyó a las investigaciones para la introducción de nuevas tecnologías de enseñanza, especialmente la plataforma Moodle. Era el responsable del boletín electrónico de la Facultad. Se mantuvo activo en estas tareas durante más de dos décadas, siempre muy cooperativo y entusiasta, mientras su salud se lo permitió. En el Núcleo del Partido de la Facultad de Física lo recordamos como un militante ejemplar, participativo y crítico, pero sin ira. Humilde y positivo, que siempre iluminaba los análisis con sus conocimientos y experiencia. "Te agradezco la tarea" era su respuesta habitual

ante cualquier solicitud.

Reacio a homenajes y reconocimientos, nunca hablaba de sí mismo. Nada creyó merecer y nada pidió. Recibió, aun así, numerosas distinciones y condecoraciones, como profesor y como cuadro, seguramente muchas menos de las que merecía. Entre ellas la Medalla por el Servicio Distinguido de las FAR y la condición de Miembro de Honor de la Asociación de Antiguos Atletas Caribes, nos hablan de lo multifacético de su actividad. Por sus excelentes cualidades como ser humano, que tanto enriquecen nuestras reservas morales, y por su valiosa contribución a la obra colectiva, Armando Pérez Perdomo representa un ejemplo imperecedero para quienes tuvimos la dicha y el honor de ser sus compañeros y también para las futuras generaciones.

Dr. Carlos Rodríguez-Castellanos, Facultad de Física, Universidad de la Habana

DEL CANAL, HACIA EL MUNDO



Fernando Guzmán Martínez (30 mayo 1951 – 16 octubre 2024)

Nacido y criado en el popular barrio de El Canal del Cerro, conservó en su carácter, su genuino origen de clase, del cual se sentía especialmente orgulloso. Estudió Licenciatura en Física en la Escuela de Física de la Facultad de Ciencias de la Universidad de La Habana (UH), en el período 1968-1972.

Comenzó su vida laboral en la Cátedra de Física del Instituto Técnico Militar en 1973, donde trabajó hasta el año 1979 cuando fue promovido a Jefe de Cátedra de Física y Química de la Escuela de Artillería Camilo Cienfuegos, de la cual fue fundador. Allí trabajó hasta 1986, cuando se incorporó a la Facultad de Ciencias y Tecnologías Nucleares (FCTN) de la Universidad de La Habana, devenido Instituto Superior de Ciencias y Tecnologías Nucleares (ISCTN) en 1987, más tarde InSTEC.

Se destacó por su dedicación al trabajo científico desde los primeros años de vida laboral. Realizó investigaciones de física teórica bajo la orientación del Profesor Elías Entralgo Herrero, de la UH. Hizo el doctorado en la Universidad Técnica de Dresden (antigua R.D.A.) en teoría de choques de iones pesados. En el período 1989 – 1993 se desempeña como diplomático: primero, como Representante Adjunto de Cuba ante el OIEA y luego, como Representante Permanente de nuestro país ante ese organismo internacional.

En 1995 es nombrado Rector del ISCTN, responsabilidad que desempeñó durante más de 10 años. En los tiempos difíciles del llamado Periodo Especial, cuando Cuba atravesó una de sus peores crisis económicas tras la extinción del campo

socialista europeo, concibe una iniciativa que, gracias a su prestigio científico, permitió reunir anualmente en La Habana a investigadores de Brasil, México, Rusia y otros países del mundo. En 1994 inaugura el primer “Workshop on Nuclear Physics”, evento internacional cuya frecuencia años más tarde fue bienal. Quiso el azar que viviera hasta unos días después del único WONP que no contó con su presencia física: el XIX, en 2024 –justo en el trigésimo aniversario del primer WONP. Mantuvo hasta el último momento de su vida estrechos vínculos de trabajo científico con destacados investigadores de varios países en el Instituto Unificado de Investigaciones Nucleares (IUIIN), donde fomentó amistades y fue uno de los más activos investigadores del InSTEC y la UH en el primer cuarto del siglo XXI. Por su prestigio en el IUIIN fue reconocido como el líder del grupo de la UH en el Experimento SPD (Spin Physics Detector), en el que participan 28 instituciones de 13 países, entre ellas 17 universidades.

No sin razón en el obituario del IUIIN se resalta que “El profesor Guzmán fue uno de los principales partidarios de la cooperación con el JINR. Gracias a él se estableció una interacción estable entre el JINR y la Universidad de La Habana en el campo de la formación de personal, y se establecieron buenas prácticas en la formación de estudiantes graduados cubanos en Dubna. Por iniciativa del profesor Guzmán, la Universidad de La Habana comenzó a colaborar en el SPD, en el colisionador NICA en construcción. Fue representante de la República de Cuba en el Consejo Científico del JINR de 2007 a 2012. Gracias a sus cualidades humanas, buen sentido del humor, liderazgo y al mismo tiempo facilidad de comunicación e inteligencia, gozó de un gran respeto por parte de estudiantes e investigadores”. Hasta su último aliento estuvo buscando oportunidades para que estudiantes de pregrado y posgrado de física nuclear participaran en investigaciones en colaboración con líderes científicos de reconocido prestigio internacional.

Nos dejó su ejemplo. No encontró tiempo para ocuparse de preparar la documentación necesaria para ser condecorado con órdenes y medallas más que merecidas. Su obra es un monumento a la modestia, a la entrega a la causa noble de formar generaciones de especialistas nucleares para el bien del futuro de la Patria en su sentido más amplio, hasta más allá del límite de lo humanamente posible. Por esas y muchas otras razones, Guzmán no se fue, ni se irá jamás; se queda en quienes lo conocieron, y en los discípulos de sus discípulos, para todos los tiempos.

Edwin Pedrero González, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba

Oscar Díaz Rizo, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba

HACIENDO NANOCIENCIA CON SUS PROPIAS MANOS



Mayra Paulina Hernández Sánchez (6 de junio de 1954, 15 de agosto de 2024)

Mayra Paulina Hernández Sánchez nació el 6 de junio de 1954 en Yaguajay, provincia de Las Villas. Estudió y se graduó de Licenciatura en Física en la Facultad de Física de la Universidad de La Habana en 1978.

Al culminar sus estudios de grado, Mayra se desempeñó como Instructor en la Universidad Central “Marta Abreu” de Las Villas hasta 1981.

Desde 1981 hasta 1986, trabajó en la Empresa de Componentes Electrónicos “Ernesto Che Guevara” de Pinar del Río. Al unísono, realizó estudios de postgrado, obteniendo en 1984, el grado de Máster en Microelectrónica en el Instituto Superior Politécnico “José Antonio Echeverría” (CUJAE) con la tesis “Caracterización de niveles conductores en la fabricación de dispositivos por Tecnología Bipolar”.

En 1986 se incorporó como Investigador Agregado al recién fundado Instituto de Materiales y Reactivos para la Electrónica (IMRE), de la Universidad de La Habana. También se desempeñó como Profesor Adjunto de la Facultad de Física de la misma alta casa de estudios, impartiendo allí las asignaturas Tecnología de Semiconductores, Laboratorio de Óptica, Laboratorio de Electromagnetismo, y Computación. En el IMRE, se destacó además en la docencia de posgrado, siendo muy demandado su curso “Química y Física de Superficies” y sus cursos en la Escuela de Verano de Ciencia y Tecnología de Materiales del IMRE. Recibió en 1996 la categoría de Investigador Auxiliar, alcanzando posteriormente la categoría de Investigador Titular. En el año 2000 obtiene el título de Doctor en Ciencias Físicas con la tesis “Caracterización físico-química de interfases metal-semiconductor”.

En los años posteriores, sería galardonada con importantes reconocimientos como la Orden “Carlos J. Finlay” (2010) y el Premio Internacional “Sofía Kovalevskaya” (2016). En 6 ocasiones, fue merecedora del Premio Nacional Anual de la Academia de Ciencias de Cuba, el último de ellos en este año 2024. En 2018, la Universidad de La Habana le concedería la categoría honorífica de Investigador de Mérito. Mayra también ejerció cargos directivos como la Presidencia del Consejo Científico del IMRE entre 2006 y 2009. Además,

fue miembro del Consejo Científico de la Universidad de La Habana entre 2006 y 2022, y desde 2018 fue Académico Titular de la Academia de Ciencias de Cuba. Mayra Paulina obtuvo importantes resultados en el estudio de la barrera Schottky en uniones no ideales metal-semiconductor. En la década de 1990 estudió también las propiedades ópticas de los materiales, y desarrolló varios métodos para la determinación de tamaños de partículas mediante mediciones ópticas, que han tenido amplio uso en varias instituciones cubanas.

Entre 2007 y 2009 dirigió la construcción y puesta en marcha del primer microscopio de barrido por efecto túnel (STM) en el país. El 24 de febrero del 2009, en las instalaciones del IMRE-UH, obtuvo las primeras imágenes de resolución atómica realizadas en Cuba (ver imagen de arriba, a la derecha). El trabajo con el STM la llevó a desarrollar durante los últimos 15 años nuevas investigaciones, ahora centradas en la adsorción de moléculas y nanopartículas en superficies. A lo largo de su carrera científica, publicó más de 70 artículos en revistas científicas. Además, participó en más de 30 proyectos de investigación, en muchos de los cuales se desempeñó como líder. Durante su trayectoria, dirigió más de 30 tesis (incluyendo grados, maestrías y doctorados) y presentó más de 170 trabajos en eventos nacionales e internacionales. Desarrolló investigaciones en reconocidos centros científicos como la Universidad Humboldt de Berlín, el Laboratorio Nacional de Luz Sincrotrón de Campinas, y el Sincrotrón Elettra de Trieste. En México, su segunda patria, como siempre decía, trabajó en varios centros investigativos. Entre ellos el CICATA-IPN Unidad Altamira, en el CINVESTAV de Mérida, y por más de 20 años en el Centro de Nanociencias y Nanotecnología (CNyN) de la UNAM, en Ensenada, donde alcanzó gran reconocimiento y estima.

Poseedora de una amplísima cultura general y científica, el saber de Mayra abarcaba campos totalmente disímiles en el mundo de la ciencia. Además del español y el inglés, conocía los idiomas francés y alemán.

Mayra fue capaz de lograr muchos de esos resultados científicos construyendo su propio equipamiento científico en el IMRE. A pesar de que muchos vaticinaban que lograr la resolución atómica con un STM en aire, en nuestras condiciones de humedad y temperatura era imposible, ella supo perseverar, asumiendo siempre como propia la frase martiana de que “De frailes que le nieguen a Colón la posibilidad de descubrir el paso nuevo está lleno el mundo, repleto de frailes. Lo que importa no es sentarse con los frailes, sino embarcarse en las carabelas con Colón.” La imagen por ella obtenida aquel febrero de 2009 fue el justo premio a tantos años de desvelos.

A pesar de presentar serios problemas de salud durante muchos años, nunca dejó que estos mermaran su obra científica... ni siquiera su sentido del humor. Se mantuvo activa en el trabajo hasta el último momento, y al fallecer

dejó inéditos varios trabajos, que nos corresponde ahora a nosotros, sus alumnos, completar y publicar. Continuar su obra será el mejor homenaje que podremos hacerle a quien es nuestra segunda madre.

Javier A. Martínez, Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba

Gema Navarro-Marín, Departamento de Física, Universidad de Basilea, Basilea, Suiza

Ransel Barzaga, Instituto de Astrofísica de Canarias, Departamento de Astrofísica, Universidad de La Laguna, Santa Cruz de Tenerife, España

UNA VIDA SEMBRANDO ÁRBOLES



José Manuel Mora-Hernández (23 de septiembre de 1964 – 30 de septiembre de 2024)

El profesor José Manuel Mora Hernández, nació el 23 de septiembre de 1964 en la provincia de Matanzas. Después de concluir la enseñanza media, el joven José Manuel realiza estudios preparatorios en el período 1983-1984 para cursar la Licenciatura para la enseñanza de Física y Matemáticas en el Instituto Superior Pedagógico de la Ciudad de Lipetsk, en la antigua URSS. Allí recibió el correspondiente Título, y el grado científico de Maestro en Ciencias Pedagógicas en 1989.

Comienza su labor como profesor en la ESBE "Hermanos Toscano" del municipio Jovellanos (provincia de Matanzas), durante el curso 1989-1990. En 1990, después de vencer un concurso de oposición, ingresa como docente en el Instituto Preuniversitario Vocacional de Ciencias Exactas "Carlos Marx" de Matanzas, donde permaneció laborando hasta su fallecimiento.

En 1991, se estrena como entrenador de estudiantes para participar en Concursos y Olimpiadas de Física. Como efecto inmediato de su actividad, la provincia de Matanzas mejora dramáticamente sus resultados en estos eventos. Entre sus primeros resultados están la medalla de Oro y bronce de Andrzej Veitia Pérez en las olimpiadas internacionales de Física (IPHO) de 1994 y 1995, respectivamente.

Comienza entonces su actividad como entrenador de la Preselección Nacional de los jóvenes cubanos a estas Olimpiadas, labor interrumpida solo en 2015 debido a que

su estado de salud comenzaba a agravarse. Tras un breve restablecimiento, comienza a trabajar de nuevo hasta que le fue imposible colaborar de una forma u otra, en muestra inequívoca de amor por su profesión y por sus estudiantes.

Tres jóvenes más de la provincia de Matanzas, resultado de sus entrenamientos, participarían en Olimpiadas de Física: Reynier Bravo, medalla de Oro en la OIF (Olimpiada Iberoamericana de Física) de Venezuela 1999 y mención en la IPHO 2000 en Inglaterra; Aroldo Hernández, mención en la IPHO de España 2005 y Miguel Ángel Carvajal, plata en la OIF de Chile 2009 y bronce en la IPHO de Croacia 2010. Participó como líder del Equipo Cuba en cuatro Olimpiadas Iberoamericanas de Física: México (2005), República Dominicana (2011), Paraguay (2014) y Colombia (2017), y en nueve Olimpiadas Internacionales: Italia (1999), Turquía (2001), Indonesia (2002), Taiwán (2003), Corea del sur (2004), España (2005), Singapur (2006), Croacia (2010) y Portugal (2018).

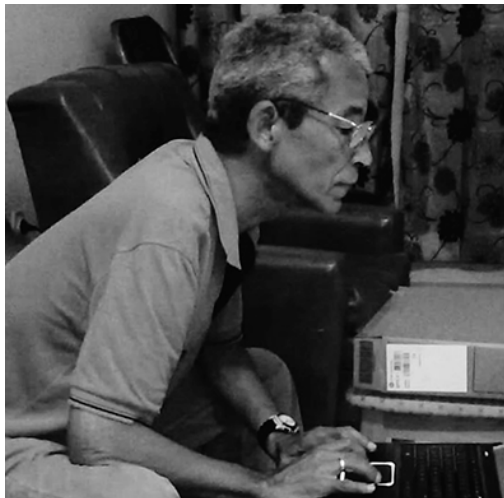
Entre sus últimos aportes a la Educación y la enseñanza de la Física están su participación en el grupo de autores de los libros de texto de la asignatura en 10mo grado y como autor principal del libro de texto de 11no grado, ahora mismo en las aulas del preuniversitario cubano.

Ser humano excepcional, siempre alegre y dispuesto, no dejó nunca que la adversidad lo disminuyera, que su alegría y voluntad de hacer por la enseñanza de la Física, por sus estudiantes y por la vida desapareciera. Tan pronto pudo acudir al aula en medio de la enfermedad, lo hizo. Cuando le fue imposible, escribió para ella. Deja colecciones de problemas para el entrenamiento del talento en Física, fruto de su trabajo y dedicación que, estando aún por publicar, pasan cada año de mano en mano de los nuevos concursantes, como si de un texto sagrado se tratara. El Profesor Mora está en ellos y estará en sus triunfos.

Amó y fue amado por sus estudiantes, su familia y sus amigos. Tuvo muchos hijos: su querida Lauren, y los que la pasión por la enseñanza de la Física fue haciendo suyos por el camino. Sembró árboles dondequiera que puso su mano. Vivió como solo sirve hacerlo: con intensidad. Usando el verbo del Apóstol, podemos decir con certeza que su muerte no es verdad, porque cumplió con creces la obra de la vida.

Saul Larramendi, Facultad de Física, Universidad de La Habana

SABIDURÍA, INTELIGENCIA Y ENTREGA A LA CUJAE



Ángel Ferrat Zaldo (30 de julio 1948 - 1 de enero 2024)

Conocí a Ferrat en el año 1967 cuando llegó a mi departamento de la Cujae en un grupo de alumnos ayudantes "captados", como era costumbre en aquella época.

Quizás sea porque ambos habíamos sido brigadistas "Conrado Benítez", o habíamos estudiado en el pre del Vedado, o porque nos gustaba la pelota, el hecho es que muy rápidamente comenzamos a hacer cosas juntos.

Juntos escribimos un capítulo del primer libro que se publicó en el departamento en 1969 siendo aún estudiantes, al que siguieron otros en los que juntos trabajamos. Confieso que sus ideas imperaban en los trabajos que hicimos y yo las interpretaba y las ejecutaba: fui durante mucho tiempo, con orgullo, su "segundo violín".

Después de graduarse como ingeniero, se hizo licenciado en Física e investigó en Pedagogía, lo que le dio la capacidad para dirigir ese complejo departamento, e intercambiar con seguridad con todos sus miembros. Se hizo doctor en Ciencias Pedagógicas, sin tutor. Pero él mismo fue tutor de muchos, sin dejar de venir un día al trabajo, sin abandonar nunca su cargo de decano de una facultad tan compleja como la de Ingeniería Eléctrica.

En Ferrat se unían la brillantez y la humildad, era un ejemplo a seguir y un hombre al que siempre se podía acudir, que dedicaba tiempo a los demás. Era increíblemente versátil.

Curiosamente, Ferrat "saltó" la categoría de profesor auxiliar. Cuando le tocaba hacer los ejercicios para esa categoría siendo jefe del departamento, le correspondió impartir una clase metodológica demostrativa en una inspección general. La clase fue evaluada por una comisión presidida el entonces ministro Dr. C. Fernando Vecino Alegret. Dejó tal impresión en la comisión, que el propio ministro sugirió se considerara

como el ejercicio para la obtención de la categoría de Profesor Titular, que así se le otorgó de manera directa; quizás un caso único en la Cujae.

En los años 1980's hubo un lamentable hecho de fraude masivo en el departamento y, como jefe, Ferrat fue sancionado a 3 meses de separación del cargo, en una plaza de técnico del laboratorio. Creo que fueron los meses de mayor avance en el desarrollo de prácticas de laboratorio de Electromagnetismo. Con sus propias manos, Ferrat construyó tableros para montar circuitos eléctricos que fueron utilizados durante muchos años por los estudiantes. Escribió también los folletos instructivos con la humildad y la genialidad que lo caracterizaban, y fue uno de los promotores del uso de los laboratorios virtuales, diseñando el primer sitio web del curso de Física en la facultad.

Fue un magnífico dirigente de la juventud y del partido, y se destacó por su claridad y sus reflexiones necesarias en cada momento. Sus cualidades lo llevaron a ser director docente metodológico, decano de la facultad de Ingeniería Eléctrica y vicerrector, con excelentes resultados.

Un día se corrió el rumor de que a uno de los profesores del departamento le habían lanzado piedras desde la facultad donde impartía clases. Cuando ese profesor fue a explicarle a Ferrat que no era verdad, este le respondió en voz baja (pero enérgicamente como solía hacerlo) que ya con el hecho de que la gente creyera que eso era cierto no debía estar impartiendo clases de Física en el departamento.

Manejaba un fino sentido del humor y la justicia de manera inteligente y respetuosa. Era un cinéfilo empedernido; fue miembro fundador del club de seguidores de los cines de la calle 23, en el Vedado. Para él, el Festival Internacional de Nuevo Cine Latinoamericano era una fiesta: veía todas las películas posibles, y siempre trataba de convencer a los demás de que lo hicieran.

Adoraba a sus hijos y a su esposa, sin cuya presencia poco a poco se fue apagando después de su temprano fallecimiento. Recuerdo una de las últimas frases que me dijo refiriéndose a su hijo menor: "David es militante del Partido".

También recuerdo la última frase que con nitidez en su voz me expresó: "dejé de fumar". Sabía él cuánto me preocupaba eso. Al conocer de su fallecimiento alguno de sus amigos nos hizo notar: "una mente tan brillante como la de él no podía seguir sin poder expresarse".

Así fue Ferrat, quien por muchos años, aportó a la Cujae su sabiduría, su inteligencia y su entrega incondicional a la educación.

Dr. C. Gilda Maria Vega Cruz, Profesora Titular Emérita y doctora Honoris Causa, Cujae

