

SANTANDER, 19-23 DE SEPTIEMBRE DE 2011

XXXII

21^o
Encuentro
Ibérico para
la Enseñanza
de la Física

Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física

tomo III

Simposio Especial Albert Fert
Simposio Multidisciplinar-Óptica
Termodinámica

PUBliCan



Ediciones
Universidad de Cantabria



XXXIII Reunión Bienal
de la
Real Sociedad Española de Física

21.º Encuentro Ibérico para la Enseñanza de la Física



Reunión bienal de la
Sociedad Española
de Física

21º Encuentro Ibérico para la Enseñanza de la Física

M.^a Teresa Barriuso Pérez (Editora)

XXXIII Reunión Bienal
de la
Real Sociedad Española de Física
21.^{er} Encuentro Ibérico para la Enseñanza de la Física

Santander, 19-23 de septiembre de 2011

RESÚMENES DE LAS COMUNICACIONES

[Tomo III]

SIMPOSIO ESPECIAL ALBERT FERT SOBRE ESPINTRÓNICA Y NANOMATERIALES

SIMPOSIO MULTIDISCIPLINAR-ÓPTICA

TERMODINÁMICA

PUBliCan



Ediciones

Universidad de Cantabria

Real Sociedad Española de Física. Reunión Bienal (33ª : 2011 : Santander)

XXXIII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física ; 21er Encuentro Ibérico para la Enseñanza de la Física. -- Santander : PubliCan, Ediciones de la Universidad de Cantabria, 2011.

Reuniones celebradas en el Palacio de la Magdalena de Santander del 19 al 23 de septiembre de 2011.

ISBN 978-84-86116-40-8 (O.C.)

ISBN 978-84-86116-41-5 (T.1)

ISBN 978-84-86116-42-2 (T.2)

ISBN 978-84-86116-43-9 (T.3)

ISBN 978-84-86116-44-6 (T.4)

Física-- Congresos.

Física-- Didáctica-- Congresos.

Encuentro Ibérico para la Enseñanza de la Física (21º : 2011 : Santander)

53(063)

53:37.02(063)

Esta edición es propiedad de PubliCan - EDICIONES DE LA UNIVERSIDAD DE CANTABRIA, cualquier forma de reproducción, distribución, comunicación pública o transformación sólo puede ser realizada con la autorización de sus titulares, salvo excepción prevista por la ley. Diríjase a CEDRO (Centro Español de Derechos Reprográficos, www.cedro.org) si necesita fotocopiar o escanear algún fragmento de esta obra.

Consejo Editorial de PubliCan - Ediciones de la Universidad de Cantabria:

Presidente: Gonzalo Capellán de Miguel

Área de Ciencias Biomédicas: Jesús González Macías

Área de Ciencias Experimentales: M.ª Teresa Barriuso Pérez

Área de Ciencias Humanas: Fidel Ángel Gómez Pérez

Área de Ingeniería: Luis Villegas Cabredo

Área de Ciencias Sociales: Concepción López Fernández y Juan Baró Pazos

Secretaría Editorial: Belmar Gándara Sancho

© Mª Teresa Barriuso Pérez (ed.)

© PubliCan - Ediciones de la Universidad de Cantabria

Avda. de los Castros, s/n. 39005 Santander

Tlfno. y Fax: 942 201 087

www.libreriauc.es

ISBN: 978-84-86116-40-8 (obra completa)

ISBN: 978-84-86116-43-9

DL: S. 1.171-2011

Impreso de España - *Printed in Spain*

Imprenta KADMOS

SALAMANCA

Saludo de la presidenta de la Real Sociedad Española de Física

Esta Reunión Bienal es la primera que se celebra desde que asumí la Presidencia de la RSEF, en enero de 2010, como primera mujer que ocupa este cargo, dándose la circunstancia de que en este año 2011 se conmemora el año internacional de la mujer científica, al cumplirse 100 años de la concesión del Premio Nobel de Química a Madame Curie, por lo que para mí significa un reto importante la celebración de este Congreso que es tradicional en la RSEF desde su creación.

Ahora bien las Reuniones Bienales están concebidas como una cita donde se muestra parte de la actividad científica de nuestro país con un programa de actividades variado y de calidad científica alta, programados en sesiones plenarias y conferencias temáticas que son impartidas por autoridades científicas mundiales y en sesiones paralelas organizadas por los Grupos Especializados de la RSEF.

Este Congreso es una buena muestra de la actividad científica de nuestro país, con la participación de los físicos que trabajan en las diferentes áreas de conocimiento de esta disciplina y con la participación, y el deseo de que aumente cada año, de jóvenes científicos recientemente licenciados o doctorados.

Como es sabido España tiene ganado y reconocido un buen prestigio en la producción científica mundial, ya que la física es precisamente la ciencia que tiene el índice más alto en España en cuanto a reconocimiento internacional.

Además la RSEF tiene una marcada voluntad de futuro para adaptarnos a lo que requiere una Sociedad Científica del siglo XXI, para lo cual continuaremos con el compromiso de seguir potenciando la Física básica, su enseñanza, su investigación y su divulgación, luchando por el fortalecimiento en España del espacio que tiene la Física en el sistema de innovación de todos los países avanzados.

A la vez de la Reunión Bienal tendrá lugar el 21º Encuentro Ibérico para la Enseñanza de la Física celebrando reuniones y debates sobre diferentes temas relacionados con la docencia.

Este libro recoge los trabajos científicos presentados en las diferentes reuniones y debates llevadas a cabo en esta Reunión Bienal.

Por último quiero agradecer el trabajo llevado a cabo por todos los comités organizadores, así como a las instituciones públicas y privadas que han colaborado para organizar este congreso considerando el momento económico en que estamos inmersos.

Finalmente en nombre del Comité Organizador quiero daros la bienvenida a la bella y acogedora ciudad de Santander, y en especial en el marco excepcional del Palacio de la Magdalena, y desearos un interesante y fructífero Congreso

MARÍA DEL ROSARIO HERAS CELEMÍN
Presidenta de la RSEF

Saludo del presidente del comité organizador

La XXXIII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física y 21º Encuentro Ibérico de Enseñanza de la Física se ha celebrado entre los días 19 al 23 de Septiembre de 2011, teniendo como sede el Palacio de la Magdalena de la ciudad de Santander.

A la presente edición se han presentado cerca de 400 comunicaciones que se han expuesto en quince simposios correspondientes a las diferentes disciplinas, así como el Encuentro Ibérico de Enseñanza de la Física. Además hemos contado con la presencia de autoridades mundiales en diferentes campos de la Física, que nos han presentado sus contribuciones en sesiones plenarias, abarcando desde los aspectos más fundamentales de la física fundamental y la cosmología a la nanotecnología, óptica, información cuántica, plasmas o aplicaciones médicas. Se ha completado con la enseñanza y la transferencia y divulgación científica. Además hemos contado con mesas redondas en temas de gran interés y coloquios multidisciplinares, diversas actividades divulgativas y festivas, así como las actividades propias de la RSEF.

Como Presidente del Comité Organizador quiero agradecer a todos los profesores invitados, a los ponentes y a todas las personas asistentes por su interés en las actividades de la RSEF. Quiero agradecer especialmente al Comité Local, constituido por personal científico de la Universidad de Cantabria, con quienes hemos preparado, con la inestimable ayuda de la RSEF y sus Grupos Especializados, la Universidad Internacional Menéndez y Pelayo, el CSIC y la propia Universidad de Cantabria, este programa de actividades variado y de calidad científica alta.

Como en anteriores ediciones, la afluencia ha sido muy sobresaliente, siendo particularmente gratificante la alta participación de jóvenes científicos recientemente licenciados o doctorados. Nuestra intención ha sido mantener este espíritu en la presente edición, destacando la relación con la Sociedad y debatiendo sobre el presente y futuro de la Física, tanto desde el punto de vista académico como de sus salidas profesionales. Esta edición coincide, además, con el año internacional de la mujer científica, al cumplirse 100 años de la obtención del Premio Nobel de Química, por parte de Mme. Curie. Queremos resaltar esta feliz coincidencia.

Quiero agradecer asimismo a todos aquellos que han colaborado a que la Bienal y el Encuentro Ibérico se haya realizado en un ambiente agradable y acogedor. Particularmente a la Agencia de Congresos Altamira, la empresa EDUCEX, la asistencia técnica de J.Molleda, a todo el personal del Palacio de la Magdalena y a todos los estudiantes que nos han ayudado a que las sesiones se celebren cómodamente. También quiero agradecer a Alberto Aguayo y al Teniente Coronel Berruezo, Jefe de la Yeguada Militar de Ibio, por su colaboración en la realización del experimento de las esferas de Magdeburgo.

Finalmente, agradecer a las entidades patrocinadoras y colaboradoras, el Ministerio de Ciencia e Innovación, el Gobierno de Cantabria, el Ayuntamiento de Santander, la Universidad de Cantabria, la Universidad Internacional Menéndez y Pelayo, el Consejo Superior de Investigaciones Científicas, el proyecto Consolider Centro Nacional de Partículas, Astropartículas y Nuclear, el Laboratorio Europeo de Física de Partículas (CERN), la editorial Reverte y la Fundación Española de Ciencia y Tecnología.

Recibid mi saludo más sincero

ALBERTO RUIZ JIMENO
Presidente del Comité Organizador

Comité de honor

- Su Majestad el Rey Don Juan Carlos I
- Excma. Sra. Ministra de Ciencia e Innovación
- Excmo. Sr. Ministro de Educación
- Excmo. Sr. Presidente del Gobierno de Cantabria
- Excmo. Sr. Secretario de Estado de Investigación
- Excmo. Sr. Secretario de Estado de Educación y Formación Profesional
- Excmo. Sr. Secretario General de Innovación
- Excmo. Sr. Secretario General de Universidades
- Excma. Sra. Directora General de Investigación y Gestión del Plan Nacional de I+D+i
- Excmo. Sr. Director General de Cooperación Internacional y Relaciones Institucionales
- Excmo. Sr. Rector de la Universidad Internacional Menéndez y Pelayo
- Excmo. Sr. Rector de la Universidad de Cantabria
- Excmo. Sr. Presidente del Consejo Superior de Investigaciones Científicas
- Excmo. Sr. Director General del Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas (CIEMAT)
- Excma. Sra. Consejera de Educación del Gobierno de Cantabria
- Excmo. Sr. Vicerrector de Investigación y Transferencia del Conocimiento de la Universidad de Cantabria
- Excma. Sra. Vicerrectora de Ordenación Académica de la Universidad Internacional Menéndez y Pelayo
- Excmo. Sr. Director General de Universidades e Investigación del Gobierno de Cantabria
- Excmo. Sr. Presidente de la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales
- Excmo. Sr. Alcalde del Ayuntamiento de Santander
- Excma. Sra. Rosario Heras Celemn, Presidenta de la Real Sociedad Española de Física
- Excmo. Sr. Antonio Fernández-Rañada y Menéndez de Lurca, expresidente de la Real Sociedad Española de Física
- Excmo. Sr. Gerardo Delgado Barrio, ex-presidente de la Real Sociedad Española de Física
- Excmo. Sr. José Manuel Fernández de Labastida, Director Departamento Gestión Científica del “European Research Council”
- Excmo. Sr. Emilio Santos Corchero, Presidente de Honor de la Sección Local de Cantabria de la RSEFA

Comité organizador

- Prof. D. Alberto Ruiz Jimeno (Presidente)
- Prof. D. Ernesto Anabitarte Cano (Secretario)
- Prof. D. Jaime Amorós Arnau (Coordinador Asuntos Económicos)
- Prof. D. Jesús Rodríguez Fernández (Coordinador Científico)
- Prof. Dña. M^a Teresa Barriuso Pérez (Coordinadora Publicaciones)
- Prof. Dña. Mercedes López Quelle (Coordinadora Organizativa)
- Prof. D. Jose María Saiz Vega (Asesor)
- Prof. D. José Ignacio González Serrano (Coordinador Técnico)
- Prof. D. Saturnino Marcos Marcos (Coordinador Encuentro Ibérico)
- Prof. D. Luis Santiago Quindós Poncela (Asesor)

Comité científico

- Prof. D. Jesús Rodríguez Fernández (Presidente)
- Prof. D. Luis Viña Liste (Presidente del Grupo Especializado de Física del Estado Sólido)
- Prof. D. José Manuel Udias Moinelo (Presidente del Grupo Especializado de Física Nuclear)
- Prof. D. Julián José Garrido Segovia (Presidente del Grupo Especializado de Adsorción)
- Prof. D. Luis Bañares Morcillo (Presidente del Grupo Especializado de Física Atómica y Molecular)
- Prof. D. Alberto Ruíz Jimeno (Presidente del Grupo Especializado de Física de Altas Energías)
- Prof. D. María Victoria Roux Arrieta (Presidente del Grupo Especializado de Calorimetría y Análisis Térmico)
- Prof. D. Luis Liz Marzán (Presidente del Grupo Especializado de Coloides-Interfases)
- Prof. D. Santiago García Granda (Presidente del Grupo Especializado de Cristalografía y Crecimiento de Cristalino)
- Prof^a. Dña. Manuela Martín Sánchez (Presidente del Grupo Especializado de Didáctica e Historia de la Física y la Química)
- Prof. D. Julio San Román del Barrio (Presidente del Grupo Especializado de Polímeros)
- Prof. D. Pedro Antonio Santamaría Ibarburu (Presidente del Grupo Especializado de Reología)
- Prof. D. Fernando Cornet Sánchez del Águila (Presidente del Grupo Especializado de Física Teórica)
- Prof. D. Jaime Amorós Arnau (Presidente del Grupo Especializado de Física de Termodinámica)
- Prof. D. José María Pastor Benavides (Presidente del Grupo Especializado de Enseñanza de la Física)
- Prof. D. Fernando Langa de la Puente (Presidente del Grupo Especializado de Nanociencias y Materiales Moleculares)
- Profra. Dña. Pilar López Sancho (Presidente del Grupo Especializado de Mujeres en la Física)
- Prof. D. Juan Manuel Rodríguez Parrondo (Presidente del Grupo Especializado de Física Estadística y No Lineal)
- Profra. Dña. Ana Ulla Miguel (Presidente del Grupo Especializado de Astrofísica)
- Prof. D. Adán Cabello Quintero (Presidente del Grupo Especializado de Información Cuántica)
- Prof. D. Carlos Hidalgo Vera (Presidente del Grupo Especializado de Física de Plasmas)
- Prof. D. Luíís Vázquez Martínez (Presidente del Grupo Especializado de Ciencias de la Vida)
- Prof. D. José Luis Casanova Roque (Presidente del Grupo Especializado de Física de la Atmósfera y del Océano)
- Prof. D. José Luis Muñiz Gutiérrez (Presidente del Grupo Especializado de Física Médica)

21º Encuentro Ibérico para la Enseñanza de la Física

COMITÉ ORGANIZADOR

- Dr. D. José María Pastor Benavides - Grupo Especializado Enseñanza de la Física (Presidente)
- Dr. D. Carlos Portela, Coordenador da Divisão de Educação da SPF y Prof. del centro ES Dr. Joaquim de Carvalho en Figueira da Foz (Portugal) (Vocal)
- Dr. D. Vitor Duarte Teodoro, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Lisboa (Portugal) (Vocal)
- Dra. D^a. Carmen Carreras Béjar, UNED (España) (Vocal)
- Dr. D. Saturnino Marcos, Universidad de Cantabria (España) (Vocal)

COMITÉ CIENTÍFICO

- Dra. D^a. Verónica Tricio Gómez, Universidad de Burgos (España) - Vicepresidenta Grupo Especializado Enseñanza de la Física (Presidenta)
- Dr. D. Horácio Fernandes, Instituto Superior Técnico, Lisboa (Portugal) (Vocal)
- Dr. D. Jorge Valadares, Universidade Aberta, Lisboa (Portugal) (Vocal)
- Dra. D^a. Paloma Varela Nieto, Universidad Complutense de Madrid (España) (Vocal)
- Dr. D. Ernesto Anabitarte, Universidad de Cantabria (España) (Vocal)

Instituciones colaboradoras

- Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN)
- Gobierno de Cantabria
- Universidad Internacional Menéndez Pelayo (UIMP)
- Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)
- Centro Nacional de Física de Partículas, Astropartículas y Nuclear (proyecto Consolider CPAN)
- Universidad de Cantabria (UC)
- Real Sociedad Española de Física (RSEF)
- Ayuntamiento de Santander

Índice

<i>Saludo de la Presidenta de la Real Sociedad Española de Física.....</i>	<i>VII</i>
<i>Saludo del Presidente del Comité Organizador.....</i>	<i>IX</i>
<i>Comité de Honor.....</i>	<i>XI</i>
<i>Comité Organizador</i>	<i>XI</i>
<i>Comité Científico</i>	<i>XIII</i>
<i>Comités del 21º Encuentro Ibérico para la Enseñanza de la Física</i>	<i>XV</i>
<i>Instituciones Colaboradoras.....</i>	<i>XV</i>
<i>Programa general de la Bienal.....</i>	<i>XXV</i>
<i>Conferenciantes invitados.....</i>	<i>XXVII</i>

Conferencias plenarias

<i>Electrons, Spins and Emerging Directions in Spintronics</i>	
A. Fert	3
<i>Graphene and its unique properties</i>	
F. Guinea	4
<i>The outreach programs for Physics and the inspired science education for High school teachers</i>	
C. Kourkouvelis	5
<i>Criticality in brain's physics and mind dynamics</i>	
D.R. Chialvo	6
<i>Optical technologies for quantum information processing</i>	
F. Sciarrino	7
<i>Fusion turbulent plasmas as complex systems</i>	
R. Sanchez.....	8
<i>Highlights from the Planck mission</i>	
J. A. Tauber	9
<i>Plasmonics: Achievements, trends, and challenges</i>	
F. J. García de Abajo	10
<i>Polarimetric study of the liquid crystal panels. Optimization for diffractive optics</i>	
M. J. Yzuel, J. Campos, A. Márquez, I. Moreno, J. Nicolás, A. Lizana, O. López-Coronado, C. Iemmi, J.A. Davis.....	12
<i>The Large Hadron Collider LHC: Entering a new era of fundamental science</i>	
R. Heuer	14

Simposio Especial Albert Fert sobre espintrónica y nanomateriales

Conferencias Invitadas

<i>Deflagración Magnética</i>	
J. Tejada, A. Hernández-Minguez, F. Macià, S. Vélez, J. M. Hernandez, V. V. Moshchalkov, J. Vanacken, W. Decelle, P. V. Santos.....	17

<i>Nucleation of a magnetic domain wall by a current pulse and its application to the structural characterization of ferromagnetic nanowires.</i>	
M. Muñoz, J.L. Prieto and E. Martínez	18
<i>Quantum Transport in Bi Nanostructures</i>	
S. Sangiao, N. Marcano, L. Perez, M. Plaza, M.R. Ibarra, J. M. De Teresa, L. Morellon	20
<i>Room temperature resistive switching in manganite thin films</i>	
L. Peña, L. Garzón, Z. Konstantinovic, F. Sandiumenge, A. Pomar, L. Balcells, C. Ocal and B. Martínez	21
<i>Single-electron spin ratchet</i>	
S.O. Valenzuela	22
<i>Spintronics with Organic Semiconductors</i>	
L. E. Hueso	23
<i>Spin selectivity of La_{0.7}Ca_{0.3}MnO₃/La_{0.3}Ca_{0.7}MnO₃ complex oxide interfaces.</i>	
J. Santamaría	24
<i>Magnetism of ordered arrays of dots and antidots</i>	
M. Vázquez, A. Asenjo and R. P. del Real	25
 Simposio Especial Albert Fert sobre espintrónica y nanomateriales	
<i>Annealing influence on martensitic transition in Ni-Mn-In Heusler alloys ribbons</i>	
L. González, J. García, W.O. Rosa, V.M. Prida, L. Escoda, J.J. Suñol, V. V. Koledov and B. Hernando	29
<i>Crecimiento de Micro- y nanoestructuras de Sb₂O₃ mediante el método de evaporación-deposición.</i>	
T. Cebriano, B. Méndez, J. Piqueras	30
<i>Crecimiento por el método VS y caracterización luminescente de nanoestructuras de ZnS</i>	
B. Sotillo, P. Fernández and J. Piqueras	32
<i>Crecimiento y caracterización de nano- y microestructuras alargadas de ZnO dopado con Tb</i>	
R. del Campo, A. Urbieto, P. Fernández, J. Piqueras	34
<i>Cyclic Spin Architectures Built from Carborane Radicals</i>	
J.M. Oliva	36
<i>Desarrollo de materiales nanocompuestos poliméricos de bajo coste con prestaciones mecánicas mejoradas</i>	
C. Manteca, A. Yedra y J. González	38
<i>Detección de nanohilos magnéticos mediante un sensor basado en la magnetoimpedancia gigante</i>	
J.A. García, D. Lago-Cachón, J.C. Martínez-García, M. Rivas, N. Fleitas	40
<i>Efecto Aharonov-Bohm en excitones confinados en anillos cuánticos bidimensionales</i>	
C. González-Santander, F. Domínguez-Adame y R. A. Römer	41
<i>Efecto doppler rotacional en resonancia magnetica</i>	
S. Lendínez, E. M. Chudnovsky, J. Tejada	43
<i>Electronic correlations at the surface of insulating oxides</i>	
A. Kedzioriski, J. Li and M.C. Muñoz	45
<i>Estudio de un sensor magnetorresistivo lineal basado en tecnología válvula de espín</i>	
J. Sánchez, D. Ramírez, S. Cardoso, P. Freitas	46

<i>Evolución con la temperatura del factor de potencia termoelectrico en películas delgadas de sulfuros metálicos</i>	
J. M. Clamagirand, J.R. Ares, I.J. Ferrer, C. Sánchez.....	48
<i>Excess specific heat in nanocrystalline metals</i>	
D. P. Rojas, L. Fernández Barquín, J. Rodríguez Fernández, L. Rodríguez Fernández and J. Gonzalez	50
<i>Interaction of Fe clusters with finite zigzag single wall carbon nanotubes from first principles calculations</i>	
F. I. Horga, A. Mañanes, M. J. López and J. A. Alonso.....	51
<i>Interferencia cuántica en anillos de grafeno</i>	
J. Munárriz, A. V. Malyshev y F. Domínguez-Adame	53
<i>Local spin-orbit interaction in quantum dots and carbon nanotubes</i>	
D. Sanchez	55
<i>Magnetic and transport properties of cobalt nanostructures grown by focused electron beam induced deposition</i>	
J.M. De Teresa, A. Fernández-Pacheco, R. Córdoba, L. Serrano, S. Sangiao, I. Serrano, L. Morellón, M.R. Ibarra.....	56
<i>Magnetic Properties of Magnetic Ionic Liquid 1-Ethyl-3-Methylimidazolium Tetrachloroferrate(Iii)</i>	
I. de Pedro, A. Garcia-Saiz, J. A. Blanco and J. Rodríguez Fernández	57
<i>Magnetic properties of TbAl₂ nanometric alloys</i>	
D. P. Rojas, L. Fernández Barquín, C. Echevarría-Bonet, J. Rodríguez Fernández	59
<i>Nanoporous Alumina Membranes for Nanomaterials Synthesis</i>	
J. García, V. Vega, W.O. Rosa, L. González, V. M. Prida, B. Hernando	60
<i>Nuevas aleaciones magnéticas basadas en NiMnSn</i>	
B. Valle García, J. M. Barandiarán, P. Lázpita, J. Gutiérrez and V.A. Chernenko.....	61
<i>Obtaining metallic nanowires using amyloid-like fibril as biotemplating and their catalytic application</i>	
J. Juárez, A. Cambón, A. Topete, M. Alatorre-Meda, M. A. Valdez, P. Taboada, and V. Mosquera.....	62
<i>Ondas acústicas en nanohilos de GaN</i>	
D. Martínez-Gutiérrez, V. R. Velasco.....	63
<i>Pressure dependence of Raman modes in double wall carbon nanotubes filled with HgTe in the rocksalt phase</i>	
E. Belandria, E. Flahaut, F. Rodríguez, R. Valiente and J. González	65
<i>Propiedades magnéticas, térmicas y eléctricas de Y₃Fe_{5-x}Al_xO₁₂ obtenido a partir de precursores nanocristalinos</i>	
D. Salazar, M. R. Diaz-Guillén, O. J. Durá, J. P. Andrés y M. A. López de la Torre	66
<i>Propiedades magnetoelásticas de heteroestructuras de [TbFe₂/Fe₃Ga]</i>	
R. Ranchal, V. González-Martín, E. López.....	68
<i>Propiedades ópticas y de emisión de campo de nanoestructuras de óxido de galio</i>	
I. López, E. Nogales, P. Hidalgo, B. Méndez, J. Piqueras	70
<i>Quantum depinning of the magnetic vortex core in micron-size permalloy disks.</i>	
R. Zarzuela, S. Vélez, J. M. Hernandez, J. Tejada, V. Novosad.....	72
<i>Resonant response of magnetostrictive/new high-T piezoelectric polymer magneto-electric laminate</i>	
J. Gutiérrez, A. Lasheras, J. M. Barandiarán, J. L. Vilas, M. San Sebastián and L. León	74

<i>Síntesis y Caracterización de TiO₂ dopado con metales de transición</i>	
C. Vázquez, M.A. Peche-Herrero, D. Maestre, A. Cremades, J. Ramírez-Castellanos, J. González-Calbet y J. Piqueras	76
<i>Searching for Magnetic Monopoles in Magnetic Materials using RXS: Haematite (alfa-Fe₂O₃) and BiFeO₃</i>	
A. Rodríguez-Fernandez, S. W. Lovesey, J.A. Blanco.....	78
<i>Síntesis de nanohilos de óxido de hierro</i>	
A. Llavona, A. Prados, B. Abad, H. Montes, M. Muñoz, L. Pérez y M.C. Sánchez	79
<i>Síntesis y caracterización de nanoestructuras y microestructuras alargadas de óxido de bismuto</i>	
M. Vila, C. Díaz-Guerra, J. Piqueras	81
<i>Synthesis and Magnetic Characterization of Transition Metal Ferrite Nanoparticles</i>	
N. Fontañá-Troitiño, M. Farle, V. Salgueirino	83
<i>Thermal variation of Electrical Resistivity and Magnetoresistance of diluted Fe-M=Au, Ag, Cu thin films</i>	
D. Alba Venero, L. Fernández Barquín, L. Rodríguez Fernández, J. Alonso, M. L. Fdez-Gubieda, A. Svalov	84
<i>Transporte eléctrico a través de impurezas individuales en nanoestructuras de silicio</i>	
M.F. González-Zalba, D. Heiss, A.J. Ferguson, D. Williams	85
<i>Upconversion cooperativa de infra-rojo a visible en polímeros de coordinación con Yb(III), Eu(III) y Tb(III).</i>	
I. Hernandez, N. Pathumakanthar, P.B. Wyatt, W.P. Gillin	87
<i>Upconversion roja, verde y azul en Y₂BaZnO₅ y Gd₂BaZnO₅ dopados con Yb³⁺, Er³⁺, Ho³⁺ y Tm³⁺.</i>	
I. Hernandez, I. Etchart, M. Berarad, M. Laroche, A. Huignard, M .N. Nordin, W.P. Gillin, R.J. Curry and A.K. Cheetham.....	89
<i>Vacancy induced magnetism in bilayer grapheme</i>	
E. V. Castro, M. P. López-Sancho, and M.A.H. Vozmediano	91
 Simposio multidisciplinar- Óptica	
<i>Análisis de la transferencia de átomos fríos en una doble trampa magneto-óptica</i>	
M.M.Valado, A.V.Carpentier, H.Michinel, J.A.Nóvoa, D. Nóvoa, J.R.Salgueiro	95
<i>Caracterización de la altura de la tropopausa química. Comparación con la altura de la tropopausa térmica y dinámica</i>	
G. Sáenz, M. García-Chamorro, D. Barriopedro y J. A. García	97
<i>Caracterización de la UVER con diferentes tipos de nubes</i>	
D. Serrano, M. J. Marín, M. P. Utrillas, F. Tena, J. A. Martínez-Lozano	99
<i>Caracterización de Medios Ópticos mediante la Descomposición Polar de la Matriz de Mueller</i>	
J. M. Sanz, J. M. Saiz, F. Moreno, F. González	101
<i>Caracterización óptica de vidrios para su utilización en módulos fotovoltaicos</i>	
J. L. Balenzategui, B. Asenjo, F. Chenlo	103
<i>Dinámica de Vórtices y Decaimiento de las Corrientes Persistentes Inducidas en S.A.T.</i>	
G. Briones, J.A. Novoa, I. Quelle, G. Domarco, L. Romaní	105
<i>Direccionalidad de la difusión de luz por partículas esféricas: revisión de las condiciones de Kerker</i>	
B. García-Cámara, R. Alcaraz de la Osa, J. M. Saiz, F. González y F. Moreno	106

<i>Dispositivos fotónicos basados en ordenamientos aperiódicos</i>	
E. Maciá	108
<i>Efecto de la resolución espacial en el análisis numérico de redes de difracción holográficas</i>	
J. Francés, S. Bleda, S. Gallego, C. Neipp, A. Márquez, I. Pascual, A. Beléndez.....	110
<i>Emisión de luz en materiales vítreos fosforescentes: comparación modelo teórico – Experimento</i>	
M. J. Pérez, F. Moreno, J. M. Saiz y F. González.....	112
<i>Estudio de las pérdidas de transmitancia por polvo acumulado en la superficie de los módulos fotovoltaicos en función del ángulo de incidencia de la radiación solar</i>	
J. Zorrilla-Casanova, M. Piliouguine, J. Carretero, P. Bernaola, P. Carpena, L. Mora-López, M. Sidrach-de-Cardona	114
<i>Estudio de los niveles de campo eléctrico de AM en un núcleo urbano</i>	
M ^a M. Rufo, J. M. Paniagua, A. Jiménez, A. Antolín, F. T. Pachón	117
<i>Influencia de la trayectoria de las masas de aire en las propiedades de los aerosoles in-situ en una ciudad costera del Mediterráneo</i>	
A.R. Esteve, V. Estellés, S. Segura, M.P. Utrillas, J.A. Martínez-Lozano	119
<i>Intercambio neto de dióxido de carbono en un ecosistema rural</i>	
V. Paredes, I.A. Pérez, M.A. García y M.L. Sánchez	121
<i>La capa de Inversión en la Tropopausa Dinámica y la Tropopausa Térmica.</i>	
G. Sáenz, T. Birner y J. A. García	123
<i>Localización del centelleo producido por el descenso repentino de TEC en la ionosfera</i>	
I. Rodríguez-Bilbao, G. Rodríguez-Caderot, B. Moreno, M. Herraiz, R. Ezquer	125
<i>Patrones de flujo en un cilindro en rotación</i>	
R. Chicharro, A. Vázquez	127
<i>Placas zonales basadas en la secuencia de Thue-Morse</i>	
A.Calatayud, L.Remón, C. Casanova, F.Giménez, W.D. Furlan y J.A.Monsoriu	129
<i>Posibles estructuras volcánicas cerca de Olympia Undae, Polo Norte de Marte</i>	
M. Sánchez-Bayton, E. Tréguier, M. Herraiz, P.Martin.....	131
<i>Propiedades polarimétricas de la luz difundida por nanopartículas</i>	
B. García-Cámara, F. González, F. Moreno	133
<i>Segmentación de imágenes cenitales de gotas sésiles para el estudio de la mojabilidad de superficies de titanio</i>	
J. F. Gómez Lopera, J. Martínez Aroza, M. A. Rodríguez Valverde, M. Cabrerizo Vílchez, J. Montes Ruiz-Cabello, M. A. Fernández Rodríguez.....	135
<i>Simulación y análisis de componentes integrados plasmónicos no lineales</i>	
J. R. Salgueiro, C. Pérez	137
<i>Sintonización plasmónica mediante interacción de nanopartículas con sustratos multicapa</i>	
P. Albella, S. M. Del Río, F. González, J.M. Saiz and F. Moreno	139
<i>Soluciones analíticas aproximadas para una familia de osciladores no lineales Conservativos</i>	
L. Hurtado, A. Márquez, E. Arribas, I. Pascual, A. Beléndez.....	141
<i>Validación del método para extraer la solución del suelo por centrifugación con rotor de ángulo fijo</i>	
J.C.Lozano, C.Prieto, P.Blanco Rodríguez, F.Vera Tomé, R.Maldonado Pérez	143

Termodinámica

<i>Análisis calorimétrico del crecimiento en cultivo de enterobacterias</i> N. Lago, J.L. Legido, I. Arias, L.M. Casás	147
<i>Aplicación de la Metodología de Monitorización de Sistemas de la Agencia Internacional de la Energía (IEA) a la Evaluación Energética Experimental de los Sistemas Activos del SP3 del PSE-ARFRISOL.</i> J.A. Díaz Angulo, J.A. Ferrer Tevar, M.R. Heras	149
<i>Aplicación de la metodología de superficie de respuesta para modelar y optimizar el proceso de Electrohilatura "Electrospinning"</i> M. Essalhi, M. Khayet, C. Cojocar, M. C. García-Payo, P. Arribas	152
<i>Aplicación del método de las medias a la evaluación energética de cerramientos constructivos</i> I. Naveros, M.J. Jiménez, M.R. Heras	155
<i>Calculo DFT del Potencial Redox Absoluto de la N-BOC-Morfolina en Disolución no Acuosa</i> L. Haya, F. J. Sayago, A. M. Mainar, C. Cativiela, J. S. Urieta	157
<i>Codigestión anaerobia de residuos de la industria del tomate y de matadero en modo semicontinuo</i> F. Cuadros, A. González, M.J. Roldán, F. Rubiales, A. Ruiz, F. López	159
<i>Conductividad térmica de nanocompuestos basados en nanotubos de carbono y grafeno en resina epoxi</i> M. Khayet, M. Gallego, J.M.Ortiz de Zárate, R.Verdejo, M.A.López-Manchado	161
<i>Determinación de las propiedades interfaciales de CH_4, H_2O y CO_2 mediante simulación molecular</i> J. M. Míguez, D. González-Salgado, P. Gómez-Álvarez, J. L. Legido, M.M. Piñeiro	163
<i>Diagrama de fases de CO_2 obtenido mediante simulación molecular</i> G. Pérez-Sánchez, J.M. Míguez, D. González-Salgado y M. M. Piñeiro	164
<i>Diagrama de fases de partículas con interacciones direccionales</i> J. Largo, F. Sciortino	166
<i>Diagrama de Fases Isobaro del Sistema (\pm)-3,7-Dimetil-1,6-Octadien-3-ol + Etanol</i> S.M. García-Abarrio, M. Torcal, J.S. Urieta, P. Pérez, L. Haya, A.M. Mainar	168
<i>Digestión anaerobia en continuo de residuos de la industria del tomate y residuos de matadero</i> F. Cuadros, A. González, M.J. Roldán, F. Rubiales, A. Ruiz, F. López	170
<i>Diseño de un sistema termostático de un calorímetro isotérmico</i> F. Garcés-Navarro, J. L. Legido, M. M. Mato, J. García	172
<i>Efectos de memoria de temperatura en aleaciones de Cu-Al-Ni</i> I. Ruiz-Larrea, M. L. N6, A. López-Echarri, J. Rodríguez-Aseguinolaza, and J. San Juan	174
<i>ELV isotérmico del sistema binario 1-propanol + 1,8-cineol entre 278,15 K y 323,15 K</i> B. Gimeno, A. M. Mainar, J. S. Urieta, P. Pérez	176
<i>Entalpías de Mezcla de (\pm) 2,6-dimetil-2,7-octadien-6-ol + Alcanoles en el intervalo (283.15-328.15) K</i> J.I. Pardo, S.M. García-Abarrio, J.S. Urieta, A. M. Mainar	178
<i>Entalpías molares de exceso de los sistemas binarios dibutil éter + isómeros del pentanol a 25°C</i> M. Domínguez-Pérez, J. Vila, M. Cabanas, L. Segade, O. Cabeza, E. Jiménez	180

<i>Estimación de la reflectividad hemisférica del terreno a partir de medidas locales de radiación solar</i>	
R. Enríquez, L. Zarzalejo, M.J. Jiménez, M.R. Heras	182
<i>Estudio de las propiedades eléctricas de membranas cargadas mediante el método de simulación por redes</i>	
A.A. Moya, J.A. Moleón.....	184
<i>Estudio del comportamiento térmico y reológico de peloides</i>	
CP. Gómez, MC. Domínguez, C. Medina, L. Mourelle, LM. Casás, JL. Legido	186
<i>Estudio Viscosimétrico de Sistemas Binarios Formamida + 1,2-Alcanodiol entre 283.15 y 313.15 K</i>	
A. El-Asmar, J.L. Trenzado, E. Romano, E.C. Bentancor, E. Gonzalez, S. Galván	188
<i>Estudio Volumétrico de Sistemas Formamida + 1,2-Alcanodiol en un Intervalo Moderado de Temperaturas</i>	
E. Romano, A. El-Asma ² , E.C. Bentancor, J.L. Trenzado, M.N. Caro, E. Gonzalez	190
<i>Estudio termofísico de mezclas de saccorhiza, bentonita y agua de mar</i>	
C. Fernández, CP. Gómez, L. Mourelle, C. Medina, JL. Legido	192
<i>Influencia de la asociación en las funciones respuesta de mezclas {alcohol+inerte}</i>	
P. Gómez-Álvarez, J. M. Míguez, D. González-Salgado, L. Romaní.....	194
<i>Influencia del disolvente y del coagulante interno en fibras huecas para destilación en membranas</i>	
L. García-Fernández, M.C. García-Payo, M. Khayet	195
<i>Luces y sombras en la historia del principio cero de la Termodinámica</i>	
C. Fernández-Pineda, S. Velasco Maíllo.....	197
<i>Potencial bi-iónico y Coeficientes de Difusión</i>	
J. A. García-Gamuz, R. P. Valerdi-Pérez y J. A. Ibáñez Mengual.....	198
<i>Propiedades térmicas de sistemas iónicos en el punto crítico líquido-líquido</i>	
P. Méndez-Castro, J. Troncoso, J. Peleteiro, L. Romaní.....	201
<i>Sincronización en cadenas estocásticas no-lineales</i>	
M. Morillo, J. Gómez Ordoñez, J. M. Casado, A. Córdoba, M. C. Lemos	202
<i>Sistema calorimétrico en el rango de temperaturas 0.05K a 30 K</i>	
T. P. Castañeda y M. A. Ramos	204
<i>Teoría y simulación de Histéresis Angular en gotas sésiles</i>	
M.J. Santos, J.A. White.....	206
<i>Teorías de perturbaciones para mezclas binarias de esferas duras no aditivas</i>	
J. R. Solana	208
<i>UNIFAC y UNIFAC-FV en el Tratamiento de la Solubilidad de Gases no Polares en Éteres Cíclicos a 101.33 kPa</i>	
F. Gibanel, J. Barrero, A.M.F. Palavra, J.S. Urieta, J.I. Pardo, A.M. Mainar	210
<i>Viscosidades de los Sistemas N-Metilformamida + 1,2-Alcanodioles a Diferentes Temperaturas</i>	
E.C. Bentancor, E. Romano, J.L. Trenzado, A. El-Asmar, S. Galván, M.N. Caro	212
<i>Volumen Molar de Exceso de Sistemas N-Metilformamida + 1,2-Alcanodioles a Diferentes Temperaturas</i>	
J.L. Trenzado, E.C. Bentancor, A. El-Asma, E. Romano, S. Galván, E. Gonzalez, M.N. Caro	214
<i>Índice de autores.....</i>	219

Programa general

	Lunes 19	Martes 20	Miércoles 21	Jueves 22	Viernes 23
09:30 - 10:30	Registro	Plenaria (F. Guinea)	Plenaria (F. Sciarrino)	Plenaria (J. Tauber)	Plenaria (R. Heuer)
10:30 - 11:00		Plenaria (C. Kourkoumelis)	Plenaria (R. Sanchez)	Plenaria (J.G. Abajo)	EPS L. Cifarelli
11:00 - 11:30					Coloquio socios
11:30 - 12:00	Inauguración	Café	Café	Café	Café
12:00 - 13:00	Plenaria (A. Fert)	Plenaria (D. Chialbo)	Plenaria (G. Mosca)	Plenaria (M.J. Yzuel)	Actos RSEF
13:00 - 14:00		Mesa redonda (Enseñanza)	EPJ (M. Bellantone)	Mesa redonda (Mujeres en Física)	Clausura
14:00 - 15:30	Comida	Comida	Comida	Comida	
15:30 - 20:00	Enseñanza Física	Enseñanza Física	Excursión	Enseñanza Física	
	F. de AA.EE. y F. Teórica	F. de AA.EE. y F. Teórica		F. de AA.EE. y F. Teórica	
	Spintrónica	Nanomateriales		Mujeres en Física	
	Física Médica	Física Médica		Materia Blanda	
	Didáctica e Historia	Inf. Cuántica		Inf. Cuántica	
	Física Nuclear	Física Nuclear		Multidisciplinar-Optica	
	Termodinámica	Termodinámica		Astrofísica y Plasmas	
		Plasmas			
	Exper. Divulgativa	Exper. Divulgativa		Exper. Divulgativa	
20:30	Recepción			Cena bienal	

Conferenciantes invitados:

<p>Prof. Albert Fert Premio Nobel Física, 2007 CNRS, Francia</p> <p><i>“Electrons, Spins and Emerging Directions in Spintronics”</i></p>	<p>Prof. Rolf Heuer Director General CERN Suiza</p> <p><i>“The Large Hadron Collider LHC: Entering a new era of fundamental science”</i></p>
<p>Prof. Jan Tauber Director Científico Misión PLANCK ESA, Países Bajos</p> <p><i>“Highlights from the Planck mission”</i></p>	<p>Prof. Dante R. Chialvo UCLA, Los Angeles, California Universidad Nacional de Rosario, Argentina</p> <p><i>“Criticality in brain’s physics and mind dynamics”</i></p>
<p>Dr. Francisco Guinea Investigador teórico en Física de Materia Condensada ICMM. CSIC. Madrid</p> <p><i>“Graphene and its unique properties”</i></p>	<p>Prof. María Josefa Yzuel Giménez Vicepresidenta de la RSEF y Presidenta de la SPIE (International Society for Optics and Photonics). Universidad Autónoma de Barcelona</p> <p><i>“Polarimetric study of the liquid crystal panels. Optimization for diffractive optics”</i></p>
<p>Prof. Fabio Sciarrino. Universidad “La Sapienza” de Roma.</p> <p><i>“Optical technologies for quantum information processing”</i></p>	<p>Prof. Raúl Sánchez Fernández Grupo de Física de Plasmas Universidad Carlos III de Madrid</p> <p><i>“Fusion turbulent plasmas as complex systems”</i></p>
<p>Dr. Javier García de Abajo Director del Grupo de Nanofotónica del CSIC Instituto de Óptica – CSIC.Madrid</p> <p><i>“Plasmonics: Achievements, trends, and challenges”</i></p>	<p>Prof. Christine Kourkouvelis Professor of Physics, University of Athens, and CERN</p> <p><i>“The outreach programs for Physics and the inspired science education for High school teachers”</i></p>
<p>Prof. Gene P. Mosca Gene P. Mosca ha sido profesor de la United Sate Naval Academy.</p> <p><i>“La enseñanza de la física en los primeros cursos de universidad en USA”</i></p>	<p>Luisa Cifarelli Presidenta de la European Physical Society</p> <p><i>“European Physical Society activities and perspectives”</i></p>
<p>Maria Bellantone Senior Publishing Editor, European Physical Journals</p> <p><i>“EPJ: a European physics tradition achieves global reach”</i></p> <p>(Chair: Maria L. Calvo Scientific Advisory Committee, European Physical Journals)</p>	<p>Coloquio socios: Revista Española de Física Coordinación: José Luis Sánchez Gómez</p>

Conferencias Plenarias

Electrons, Spins and Emerging Directions in Spintronics

A. Fert

UMP CNRS/Thales, Palaiseau and Université Paris-Sud, Orsay, (France)

Spintronics exploits the influence of the electron spin orientation on electronic transport. It is mainly known for the “giant magnetoresistance” (GMR) and the large increase of the hard disc capacity obtained with read heads based on the GMR, but it has also revealed many other interesting effects. Today spintronics is developing along many novel directions with promising prospects as well for short term applications as for the “beyond CMOS” perspective. After an introduction on the fundamentals of spintronics, I will review some of the most interesting emerging directions of today: spin transfer and its applications to STT-RAMs or to microwave generation, spintronics with semiconductors, graphene and carbon nanotubes, Spin Hall Effects, neuro-morphic devices etc.

Graphene and its unique properties

Francisco Guinea

Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, CSIC, Cantoblanco E-28049 Madrid, Spain (Spain)

Graphene is a unique material, with special features such as extreme two dimensionality, high mobility metallic transport due to mass less carriers, largest known elastic constants, very flexible, ... Some of these properties will be reviewed, as well as on-going research intended to elucidate their origin.

The outreach programs for Physics and the inspired science education for High school teachers

Christine Kourkouvelis

Professor of physics, University of Athens

Since the large experiment started at CERN, the need for communicating with the public and transferring the knowledge acquired, became more urgent. This was due to the need of sharing the excitement of the researchers and informing the public about the use of public funds on one hand, and on the other hand, the need to bridge the clear gap of between teaching and research.

We have developed an interactive event display for the events collected at LHC by the ATLAS experiment, called HYPATIA. Using HYPATIA the teachers and students can view the events and at the same time analyze them, the way the real researchers do.

The example of high energy physics educational tools will be used to illustrate the EU driven efforts for the introducing novel pedagogical techniques in schools which require the continuous iterative process of questions, active investigation and creation by the students. The EU outreach programs "Learning with ATLAS@CERN", "Pathway to Inspired Science Teaching", "Discover the COSMOS" will be discussed and examples will be given.

Criticality in brain's physics and mind dynamics

Dante R. Chialvo

CONICET, Universidad Nacional de Rosario, Argentina & University of California, Los Angeles, USA.

It is well known that dynamical systems posed near a second order phase transition generate a bewildering variety of flexible behavior, associated with the abundance of metastable states at the critical point. This universal feature led us to conjecture, since the last millennium, that the most fundamental cognitive properties of the functioning brain are only possible because spontaneously stays near criticality. In this talk first we discuss which aspects of the mind dynamics can be usefully explained in terms of critical phenomena. Then we review recent experimental results, both in health and disease, at various brain scales, ranging from a few millimeters up to the entire brain supporting our conjecture. Finally we discuss the lessons and implications for the design of emergent intelligent devices.

Optical technologies for quantum information processing

Fabio Sciarrino

Dipartimento di Fisica, Sapienza Università di Roma

Photons are a natural candidate for quantum information transmission, quantum computing, optical quantum sensing, and metrology. In the last few years, the Quantum Optics group of Roma has contributed to develop different experimental photonic platforms to carry out quantum information processing based on different photon degrees of freedom.

The standard encoding process of quantum information adopting the methods of quantum optics is based on the two-dimensional space of photon polarization. Very recently the orbital angular momentum (OAM) of light, associated to the transverse amplitude profile, has been recognized as a new resource, allowing the implementation of a higher-dimensional quantum space, or a “qudit”, encoded in a single photon. Our research topic is based on the study of new optical devices able to couple the orbital and spinorial components of the photonic angular momentum[1]. Such devices allow to manipulate efficiently and deterministically the orbital angular momentum degree of freedom, exploiting both the polarization and the OAM advantages [2]

Another approach exploits integrated optical technology which may represent an excellent experimental platform to carry out quantum information processing. We report the realization of a laser written beam splitter in a bulk glass able to support polarization encoded information [3]. We demonstrated integrated quantum optical circuits, like CNOT gate [3]. The maskless technique, the single step easy fabrication, the possible three-dimensional layouts and the circular transverse waveguide profile able to support the propagation of gaussian modes with any polarization state make this approach promising to carry out optical quantum information processing.

REFERENCES:

1. E. Nagali, et al., *Phys. Rev. Lett.* **103**, 013601 (2009).
2. E. Nagali, et al., *Nature Photonics* **3**, 720 (2009); E. Nagali, et al., *Phys. Rev. Lett.* **105**, 073602 (2010).
3. L. Sansoni, et al., *Phys. Rev. Lett.* **105**, 200503 (2010); A. Crespi, et al. [arXiv:1105.1454]

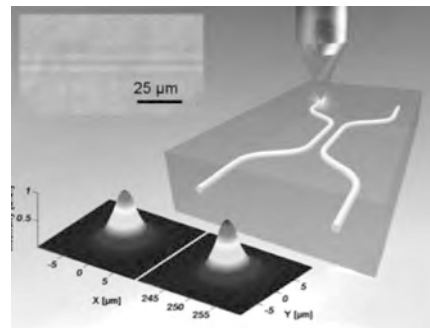


Figure 1. Schematic of the laser-written directional coupler in the bulk of a glass.

Fusion turbulent plasmas as complex systems

R. Sanchez

Departamento de Física, Universidad Carlos III de Madrid, 28021 Madrid (Spain);

In nature there are many systems that exhibit some form of self-organization from which a priori unexpected structures and dynamical behaviors emerge. These are unexpected specially when examined in the light of the physical mechanisms that govern each of the individual elements that form the system. Several common ingredients seem to be needed for complex dynamics to emerge: strong nonlinear interactions between many independent elements or degrees of freedom, the presence of instability thresholds, fluctuations and external drives for the system. Examples of these systems are forest fires, earthquakes, sandpiles, and even aspects of economics and society itself.

Magnetically confined plasmas of interest for the production of fusion energy also exhibit self-organized behavior. Although the underlying equations governing these plasmas are apparently simple, their behavior is extraordinarily varied and subtle as a result of their extreme susceptibility to the presence of electric and magnetic fields. Complexity is manifested via the spontaneous formation of interesting spatial structures and complex dynamical behaviors that span a wide range of length and time scales. The excitation of zonal flows by plasma turbulence and the way these flows affect the leakage of energy and particles out of the magnetic traps containing these plasmas is one such example of particularly important practical consequences. The dynamics of energy confinement in these turbulent plasmas in near-marginal conditions is another. The way in which tools and ideas imported from the so-called '*science of complexity*' can help to understand the underlying physics and to thrust the further development of these prototype fusion reactors will be described in a non-specialized way.

Highlights from the Planck mission

J. A. Tauber, on behalf of the Planck Collaboration

Astrophysics Division, Research and Scientific Support Dpt., European Space Agency, Noordwijk (The Netherlands);

Planck is an astronomical satellite part of the Scientific Programme of the European Space Agency, which is designed to image the anisotropies of the Cosmic Microwave Background (CMB) over the whole sky, with unprecedented sensitivity ($\Delta T/T \sim 2 \times 10^{-6}$) and angular resolution (~ 5 arcminutes). Planck will provide a major source of information relevant to several cosmological and astrophysical issues, such as testing theories of the early universe and the origin of cosmic structure. The ability to measure to high accuracy the angular power spectrum of the CMB fluctuations will allow the determination of fundamental cosmological parameters with an uncertainty better than a few percent. In addition to the main cosmological goals of the mission, the Planck sky survey will be used to study in detail the very sources of emission which “contaminate” the signal due to the CMB, and will result in a wealth of information on the properties of extragalactic sources, and on the dust and gas in our own galaxy. The ability of Planck to measure polarization across a wide frequency range (30–350 GHz), with high precision and accuracy, and over the whole sky, will provide unique insight into specific cosmological questions, but also into the properties of the interstellar medium.

Planck was launched together with Herschel on 14 May 2009. In January 2011 the first data products² and scientific results were released to the public³. By September 2011, it will have completed four full sky surveys. I will present an overview of the Planck mission, its scientific objectives, current status, and highlights from among its first scientific results.



Figure 1. A map of the whole sky as seen by Planck after the first all-sky survey.

REFERENCES:

1. <http://www.esa.int/Planck>
2. http://www.sciops.esa.int/index.php?project=planck&page=Planck_Legacy_Archive
3. http://www.sciops.esa.int/index.php?project=PLANCK&page=Planck_Published_Papers

Plasmonics: Achievements, trends, and challenges

F. Javier García de Abajo

Instituto de Óptica – CSIC, Serrano 121, Madrid, Spain; J.G.deAbajo@csic.es.

Surface plasmons, the electromagnetic excitations coupled to collective conduction-electron oscillations at metal surfaces, are pillar stones of applications as varied as ultrasensitive optical biosensing, photovoltaics, optoelectronics, and quantum-information processing. The growing plasmonics community gathered around these fields combines a multidisciplinary range of expertises that are currently generating new discoveries at an impressive pace. In this talk, we will discuss prominent examples and recent achievements based on plasmons.



Figure 1. Left: The morphology and size of nanoparticles, and in notoriously gold nanoparticles, can now be controlled with sufficient accuracy to produce monodisperse particle assemblies with well-defined plasmons that rule their optical properties. This image shows nanoparticles produced at different stages of a colloidal reaction going from 60-nm rods to larger octahedra. The background and particle colors indicate how they appear in solution under light reflection and transmission conditions, respectively. Center: Small gaps between metals, such as those formed between the tips of star-shaped nanoparticles and a planar gold surface, produce large concentration of light intensity that is used to make spectroscopy of single molecules. Right: Plasmons can propagate along waveguides, for example within the gap between a nanowire pair, which has been postulated as a solution to achieve high volumen density of optical components.

The field of plasmonics started over half a century ago with the prediction [1] and subsequent observation [2] of surface plasmons. These initial studies relied on fast electrons to excite the new modes. Actually, electron-microscope imaging and spectroscopy has played a central role in this field, which is now enhanced by the availability of a new generation of electron microscopes with outstanding energy and space resolution. Electron energy-loss spectroscopy and cathodoluminescence spectroscopy have contributed to understand plasmons both in extended systems and in nanoparticles. We will examine several examples of plasmon mapping using these techniques [3].

Plasmons are capable of producing light intensity enhancement at so-called optical hot spots. This effect is remarkably efficient at the gaps between sharp metal tips (see Fig. 1), leading to local-field intensities over five orders of magnitude higher than the intensity of the externally supplied light. Such large optical enhancement finds application in drug delivery, tumoral treatments, and ultrasensitive chemical analysis, down to the single-molecule level, particularly when analyzing molecule-specific vibrational levels via surface-enhanced Raman scattering [4].

New trends in plasmonics research will be briefly discussed, and in particular, the interaction between electrons, photons, and plasmons at the single-particle level (quantum plasmonics); tunable plasmons in highly doped graphene (graphene plasmonics); and improved photovoltaics.

REFERENCES

1. Ritchie R. H., *Physical Review*, **106**, 874-881 (1957)
2. Powell C. J., Swan J. B., *Physical Review*, **115**, 869-875 (1959)
3. García de Abajo, F. J., *Reviews of Modern Physics*, **82**, 209-275 (2010)
4. Rodríguez-Lorenzo, L. *et al.*, *Journal of the American Chemical Society*, **131**, 4616-4618 (2009)

Polarimetric study of the liquid crystal panels. Optimization for diffractive optics

M. J. Yzuel,¹ J. Campos,¹ A. Márquez,² I. Moreno,³ J. Nicolás,⁴ A. Lizana,¹ O. López-Coronado,¹
C. Iemmi,⁵ J.A. Davis,⁶

¹Departamento de Física, Universidad Autónoma de Barcelona, 08193 Bellaterra (Spain);

²Depto. de Física, Ingeniería de Sistemas y Teoría de la Señal, Universidad de Alicante (Spain);

³Dept. Ciencia y Tecnología de Materiales. Univ. Miguel Hernández, Elche (Spain);

⁴ALBA Synchrotron Light Source Facility. 08290 Cerdanyola del Vallès. (Spain);

⁵Dept. de Física, Fac. de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires (Argentina);

⁶Department of Physics, San Diego State University, San Diego, California 92182 (USA).

LC panels are widely used in diffractive optics (DO). Some applications are related with the generation of lenses and the change of the optical systems behavior. These panels are also used in digital holography. The introduction of elliptically polarized light [1, 2] in the use of twisted nematic liquid crystal displays improves the phase only modulation and the optimization of their performance in diffractive optics. In optical pattern recognition we implemented optical processors for the recognition of color objects, using the color distribution, in the discrimination process. Another research line that we have developed is the design and implementation of apodizing filters in imaging systems.

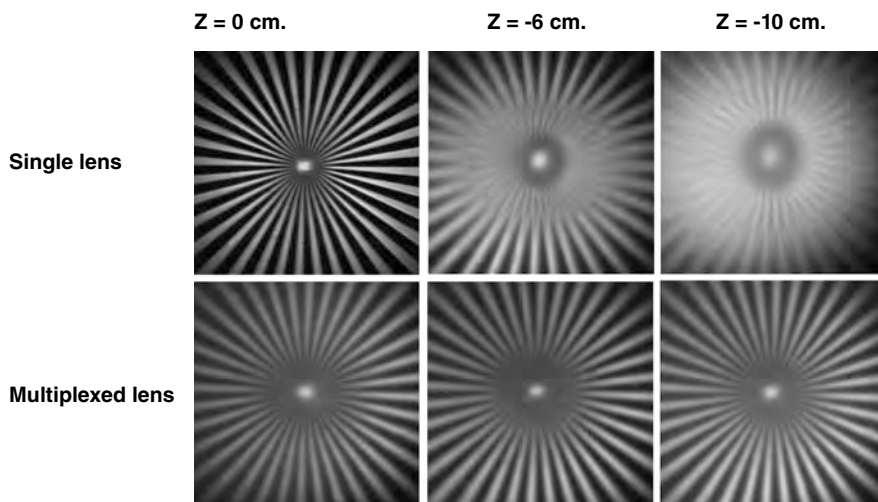


Figure 1. Images of the Siemens star captured at the best image plane ($Z = 0$) and defocused planes ($Z = -6$ cm and $Z = -10$ cm) when a single lens and a multiplexed lens (M33) are generated in a liquid crystal panel

We have also analyzed the design of diffractive lenses by the generation of phase elements resulting from the multiplexing of diffractive lenses to increase the depth of focus [3] (Figure 1). In this presentation we analyze the use of transmission liquid crystal displays and liquid crystal on silicon (LCoS) displays that work in reflection.

We have implemented Diffractive Optical Elements on LCoS displays working in reflection. The influence of the temporal phase fluctuations [4] is shown in Figure 2.

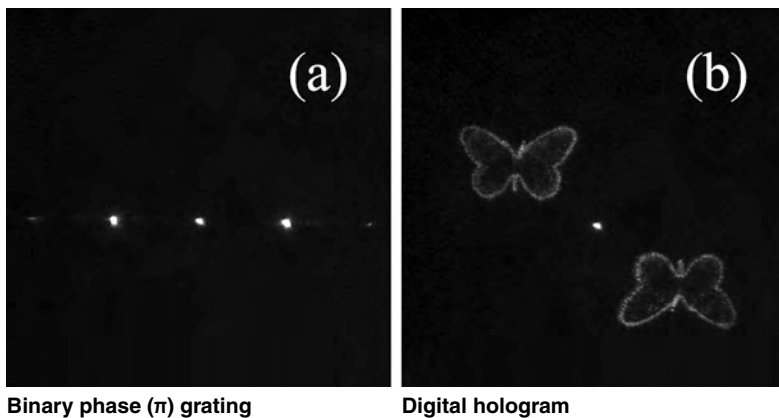


Figure 2. Generation of Diffractive Optical Elements on LCoS displays. The zero order is due to the temporal phase fluctuations

REFERENCES:

1. A. Márquez, C. Iemmi, I. Moreno, J. A. Davis, J. Campos and M. J. Yzuel, "Quantitative prediction of the modulation behavior of twisted nematic liquid crystal displays based on a simple physical model," *Opt. Eng.* 40, 2558-2564 (2001).
2. A. Márquez, I. Moreno, C. Iemmi, A. Lizana, J. Campos and M. J. Yzuel, "Mueller-Stokes characterization and optimization of a liquid crystal on silicon display showing depolarization," *Opt. Express* 16, 1669-1685 (2008)
3. C. Iemmi, J. Campos, J. C. Escalera, O. López-Coronado, R. Gimeno and M. J. Yzuel, "Depth of focus increase by multiplexing programmable diffractive lenses," *Opt. Express* 14, 10207-10219 (2006)
4. A. Lizana, I. Moreno, A. Márquez, C. Iemmi, E. Fernández, J. Campos and M. J. Yzuel, "Time fluctuations of the phase modulation in a liquid crystal on silicon display: characterization and effects in diffractive optics," *Opt. Express* 16, 16711-16722 (2008)

The Large Hadron Collider LHC: Entering a new era of fundamental science

Rolf Heuer

CERN, European Organization for Nuclear Research
Geneva, Switzerland

With the start of the Large Hadron Collider (LHC) at CERN, particle physics is entering a new era. The LHC will open up a new chapter in high-energy physics, providing a deeper understanding of the universe and any of the insights gained could change our view of the world. We expect revolutionary results about the origin of matter, the nature of dark matter and possibly glimpses of extra spatial dimensions. The talk will address the exciting physics prospects offered by the LHC, present first results since the start of data taking on 30 March thlast year and will have a forward look to particle physics at the energy frontier.

**Simposio especial Albert Fert
sobre espintrónica y nanomateriales**

[Conferencias Invitadas]

Deflagración Magnética

J. Tejada¹, A. Hernández-Minguez¹, F. Macià¹, S. Vélez¹, J. M. Hernandez¹,
V. V. Moshchalkov², J. Vanacken², W. Decelle², P. V. Santos³

¹Facultat de Física, Universitat de Barcelona, Diagonal 645, 08028 Barcelona, Spain

²INPAC-Institute for Nanoscale Physics and Chemistry, Katholieke Universiteit Leuven, Celestijnenlaan 200D, B-3001 Leuven, Belgium

³Paul-Drude-Institut für Festkörperelektronik, Hausvogteiplatz 5-7, 10117 Berlin

La deflagración magnética es un nuevo fenómeno de relajación magnética que se observó por primera vez en imanes moleculares (1,2) y, posteriormente, se extendió en manganitas (3,4) y aleaciones intermetálicas como el Gd_5Ge_4 (5). Todos estos sistemas se caracterizan por exhibir un efecto magnetocalórico gigante asociado a la transición magnética que da lugar al fenómeno de la deflagración magnética. Ésta energía es la que juega el papel de la energía de combustión de la deflagración por lo que, al estar asociado a un reordenamiento de estados de espín del sistema, es un fenómeno no destructivo a diferencia de lo que ocurre en una deflagración química convencional.

En el caso de los imanes moleculares, la energía magnética de la combustión viene dada directamente por la energía Zeeman de interacción del campo externo con los espines de los clústeres, mientras que en el caso de manganitas y los compuestos intermetálicos, ésta energía es una combinación entre la energía Zeeman y la energía intrínseca de las diferentes fases cristalográficas envueltas en la transición. En imanes moleculares, tanto el mecanismo de encendido de la deflagración como la velocidad de la misma, tienen propiedades cuánticas (2,6) directamente relacionadas con las propiedades cuánticas de los clústeres (7). Además, existe evidencia de la transición entre deflagración a detonación magnética cuando el proceso de inversión de espín se realiza mediante campos pulsados (8). Por otro lado, en el caso de las manganitas, se ha observado una transición magnetoresistiva gigante (4) mientras que en el caso de la aleación de Gd_5Ge_4 , simultánea a la deflagración magnética, ocurre una transformación magnetoestructural (5). Ambos fenómenos están asociados a las diferentes propiedades eléctricas, magnéticas y cristalográficas entre las diferentes fases envueltas en el proceso de deflagración.

Para el estudio de las propiedades del fenómeno de la deflagración magnética, diversas técnicas de encendido del proceso han sido desarrolladas como puede ser el envío pulsos de calor o a través de ondas acústicas superficiales. Por otro lado, para la medición de la velocidad de la llama magnética se han usado sondas Hall, bobinas, magneto-óptica o magnetometría SQUID. El objetivo de la charla es revisar estos experimentos así como darles una interpretación en el marco de la teoría de la deflagración magnética (9).

1. Y. Suzuki *et al.* Phys. Rev. Lett. **95**, 147201 (2005).
2. A. Hernández-Minguez *et al.* Phys. Rev. Lett. **95**, 217205 (2005).
3. F. Macià *et al.* Phys. Rev. B **76**, 174424 (2007).
4. F. Macià *et al.* Phys. Rev. B **77**, 012403 (2008).
5. S. Velez *et al.* Phys. Rev. B **81**, 064437 (2010).
6. F. Macià *et al.* Phys. Rev. B **79**, 092403 (2009).
7. J. R. Friedman *et al.* Phys. Rev. Lett. **76**, 3830 (1996).
8. W. Decelle *et al.* Phys. Rev. Lett. **102**, 027203 (2009).
9. D. A. Garanin and E. M. Chudnovsky Phys. Rev. B **76**, 054410 (2007).

Nucleation of a magnetic domain wall by a current pulse and its application to the structural characterization of ferromagnetic nanowires

M. Muñoz,¹ J.L. Prieto² and E. Martínez³

¹Instituto de Física Aplicada, CSIC, Serrano 144, 28006 Madrid (Spain);

²Instituto de Sistemas Optoelectrónicos y Microtecnología, UPM Avda. Complutense s/n, 28040 Madrid, (Spain)

³Departamento de Física Aplicada, Universidad de Salamanca, Plaza de los Caídos, s/n, 37008, Salamanca, Spain

Most of the recent studies dedicated to magnetic domain walls (DW) in ferromagnetic nanowires, rely on the nucleation of a DW by one of these three methods: injection pad [1], saturation on a corner of the wire [2] or via the generation of a local magnetic field by a current pulse flowing through an adjacent conductive stripe [3]. While the first two methods can nucleate a DW only as fast as the saturating field is cycled (perhaps once every second), the last one of them can nucleate a DW in only very few nanoseconds. This is a very important advantage for stochastic studies or for studies where the measurement has to be performed hundreds or even thousands of times, like the measurements of the velocity of a DW in a nanowire [4]. Despite the importance of this DW injection method, a thorough study of this nucleation process is not yet available.

In this work we explore in detail the particularities of the nucleation of a DW via a current pulse flowing through an adjacent conductive stripe, both by micromagnetic simulations and experimentally. We find that the DW is nucleated during the first nanosecond of the pulse. Therefore, for pulses of few nanoseconds, the DW is moving in the wire while the current pulse is still flowing through the conductive line. The magnetic field generated by the current pulse is quite intense even several microns away from the current line, especially on the perpendicular to plane direction, affecting the movement of the DW. This field should be taken into account for any study related to the velocity or structure of a DW generated with this method. An example of a sequence of nucleation for a 25ns pulse is shown in Figure 1, on a 300nm wide 10nm thick permalloy nanowire and with a 500 nm conductive line. The magnetic field generated by the current pulse nucleates a pair of DW that move in opposite directions. Both DWs move under the effect of the external magnetic field and/or the field generated by the current pulse. By comparing the micromagnetic simulations and the experimental results we have seen that the edge roughness of the wire and the temperature are quite important setting the type of DW that is injected (in a 300 nm wide and 10 nm thick permalloy nanowire).

Additionally we have measured experimentally the probability of nucleating a DW with this method with the setup displayed in Figure 2a. The DW is detected by the drop of resistance due to the AMR of the DW, with a lock-in technique. This measurement is a quasi-DC measurement in comparison to the time that the DW takes to cross the entire length of the wire, so the DW can be detected only when it stops between both contacts (Figure 2a). Figure 2b shows the probability map for the detection of a DW for a range of current densities and external magnetic fields. We find probability 100% even for zero external magnetic field in wide range of current densities. The high reliability of this technique has been contrasted over many wires. Note that the area of

probability one (red area in Fig.2b) ends at the propagation field of the nanowire. For higher fields, the DW crosses the wire undetected by our quasi-DC AMR method. Moreover, this probability map can give indirect information of the structural quality of the wire (edge roughness) which is directly linked to the propagation field. We show that a probability map like the one of Figure 2b constitutes a powerful technique to check the structural quality of the ferromagnetic nanowire, which is of pivotal importance for many experimental works in this field.

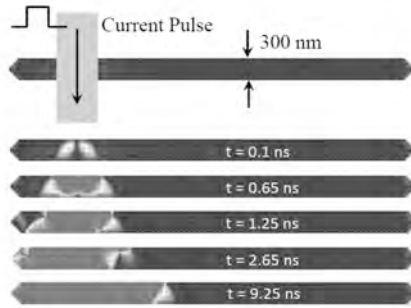


Figure 1. Sequence of the nucleation of a pair of DWs by a current pulse flowing through and adjacent conductive line.

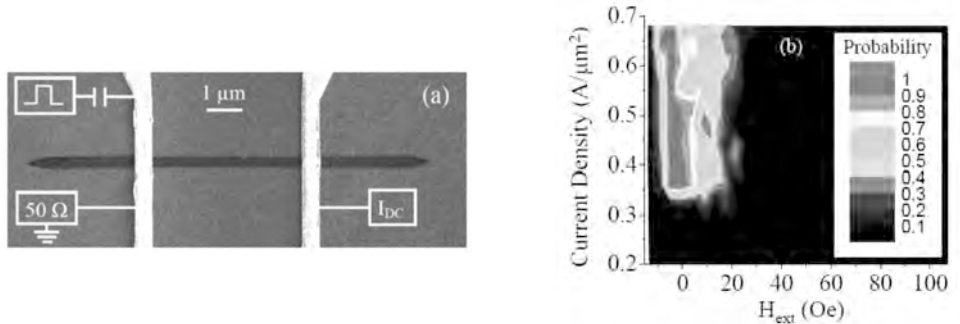


Figure 2. (a) Experimental set-up (b) Probability map of the nucleation and detection of a DW between the contacts.

REFERENCES:

- [1] M.-Y. Im, L. Bocklage, P. Fisher, and G. Meier, Phys. Rev. Lett. 102, 147204 (2009).
- [2] E. R. Lewis, D. Petit, L. O'Brien, A. Fernandez-Pacheco, J. Sampaio, A.-V. Jausovec, H. T. Zeng, D. E. Read and R. P. Cowburn, Nat. Mat. 9, 2857 (2010).
- [3] M. Hayashi, L. Thomas, C. Rettner, R. Moriya, Y. B. Bazaliy, and S. S. P. Parkin, Phys. Rev. Lett. 98, 037204 (2007)
- [4] M. Hayashi, L. Thomas, C. Rettner, R. Moriya and S.S.P.Parkin, Nat. Phys. 3, 21 (2007).

Quantum Transport in Bi Nanostructures

S. Sangiao,¹ N. Marcano,^{2,3} L. Perez,⁴ M. Plaza,⁵ M.R. Ibarra,¹ J. M. De Teresa,³ L. Morellon,¹

¹Instituto de Nanociencia de Aragon (INA), Universidad de Zaragoza, 50018 Zaragoza (Spain);

²Centro Universitario de Defensa (CUD), Academia General Militar, 50090 Zaragoza (Spain);

³Instituto de Ciencia de Materiales de Aragon (ICMA), CSIC-Universidad de Zaragoza, 50009 Zaragoza (Spain);

⁴Departamento de Física de Materiales, Universidad Complutense de Madrid, 28049 Madrid (Spain);

⁵Cornell University, Ithaca, NY 14853 (USA)

Semimetal bismuth (Bi) is one of the most studied elements in solid-state physics because of its unique electronic properties. The Fermi wavelength is about 30 nm, which is more than a factor of 100 larger than in regular metals. Moreover, the mean-free path in Bi can be as much as several millimeters, several orders of magnitude larger than those for most metals. These characteristics make Bi a suitable candidate to study both classical and quantum size effects. In addition, the presence of Rashba spin split surface states is of interest for spintronics. In this contribution we summarize our recent work on the magnetotransport properties of Bi thin films [1] (Figure 1, left) and single nanowires (Figure 1, right) [2]. Specifically, the role of the surface states [3] and weak antilocalization effects [4] in the magnetotransport of ultrathin films will be addressed. Ongoing work on Bi nanostructures fabricated by focused-ion-beam and/or electron-beam lithographic techniques will be outlined.

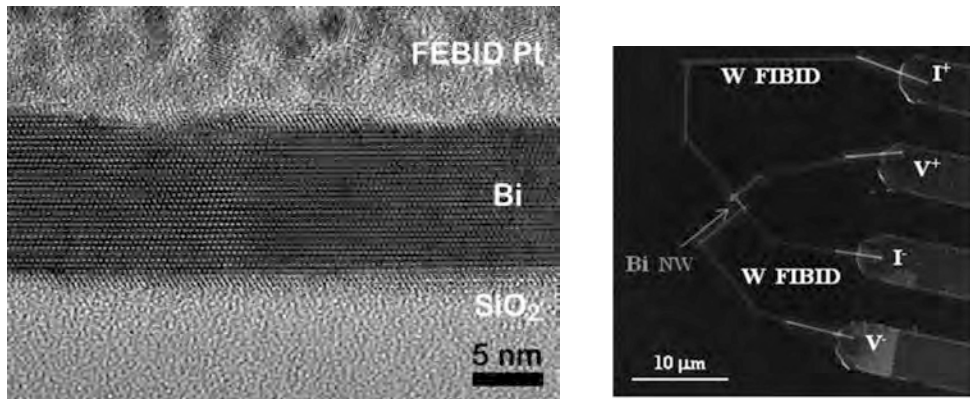


Figure 1. (Left) HRTEM image of a Bi thin film grown on SiO₂ and capped with a Pt protective layer. (Right) SEM image of a single Bi nanowire contacted with W nanodeposits.

REFERENCES:

1. Marcano, N. et al.; J. Magn. Magn. Mater., **322** (2010) 1460.
2. Marcano, N. et al.; Appl. Phys. Lett., **96** (2010) 082110.
3. Marcano, N. et al.; Phys. Rev. B, **82** (2010) 125326.
4. Sangiao, S. et al.; submitted to Europhys. Lett. (2011).

Room temperature resistive switching in manganite thin films

Luis Peña, Luis Garzón, Z. Konstantinovic, F. Sandiumenge, A. Pomar, Ll. Balcells,
C. Ocal and B. Martínez

Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC) Campus UAB, Bellaterra 08193.

Resistive switching, i.e. the switching between two distinct resistive states electrically controlled, is currently a subject of major interest because of its very promising properties for the implementation of data storage devices. In this work we report on the reversible transitions from low resistive (LR) to high resistivity (HR) states in high quality manganite thin films (LSMO) prepared by RF sputtering on top of (001) oriented STO substrates. The transitions between the LR and HR states are induced by the application of a bias voltage by means of the conducting tip of a scanning force microscope. The experimental setup is arranged in order to avoid parasitic interfacial phenomena (e.g., metal diffusion) or electrode interconnections (e.g., filamentary formation). Our experiments show that the high resistivity state is stable at long term period. The magnetotransport properties and thermal stability of these LR and HR states are investigated in order to gain a deeper insight into the nature of the structural/electronic modifications generated by the application of high electric field by means of the AFM tip on the manganite film.

Single-electron spin ratchet

S.O. Valenzuela^{1,2}

¹Ctr Invest Nanociencia & Nanotecnol CIN2, Inst Catala Nanotecnol, E-08193 Barcelona, Spain

²ICREA, E-08010 Barcelona, Spain

We describe a spin ratchet at the single-electron level [1] that produces spin currents with no net bias or charge transport. Our device is based on the ground-state energetics of a single-electron transistor (SET). The SET comprises a superconducting island connected to normal leads via tunnel barriers with different resistances that break spatial symmetry. We demonstrate spin transport and quantify the spin ratchet efficiency by using ferromagnetic leads with known spin polarization.

REFERENCIAS

- [1] M.V. Costache and S.O. Valenzuela, *Science* 330, 1645 (2010)

Spintronics with Organic Semiconductors

Luis E. Hueso^{1,2}

¹CIC nanoGUNE, San Sebastián; l.hueso@nanogune.eu

²IKERBASQUE, Basque Foundation for Science, Bilbao

Organic semiconductors have proved to be very relevant electronic materials. Their greatest success has been undoubtedly achieved so far in the optoelectronics field, where display products based on hybrid light emitting diodes with organic emitter (OLEDs) have become available to consumers, and organic photovoltaic devices are challenging existing commercial applications.

These organic materials have recently caught the attention of spintronics, and significant efforts are being made towards their integration in this field. Their most attractive aspect for spintronic applications is the weakness of the spin scattering mechanisms in OSC, implying that the spin polarization of the carriers can be maintained for a very long time in these materials. Noticeably, spin relaxation times in excess of 10 microseconds have been reported by different resonance techniques, values exceeding by orders of magnitude the characteristic times detected in inorganic materials. Moreover, these materials have extremely tunable chemical properties, opening a way for the integration of synthetic chemistry into spintronic devices.

In this talk I shall focus on the major achievements and questions arising from electrical spin injection and transport in organic semiconductor materials. I will begin by presenting and discussing the concepts and facts which are widely accepted by the community and will conclude by addressing the most controversial issues and open questions.

REFERENCIAS

1. Dediu V.A., Hueso L.E., Bergenti I., Taliani, C. *Nature Materials* **8**, 707-712 (2009), 8, 707

Spin selectivity of $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3/\text{La}_{0.3}\text{Ca}_{0.7}\text{MnO}_3$ complex oxide interfaces.

Jacobo Santamaría

GFMC, Departamento de Física Aplicada III, Universidad Complutense de Madrid, 28040 Madrid, Spain

Interfaces between complex oxides are attracting great interest due to their exciting and unexpected properties. Many complex transition metal oxides share a common perovskite structure with similar lattice parameters, allowing very different ground states (ferromagnets, superconductors, multiferroics, etc) to be brought into direct contact at (structurally) highly ordered interfaces. Novel and interesting effects may result from their competition and interplay. Modified bonding at the interface may be at the bottom of the appearance of interesting novel behaviours not appearing in the bulk constituents. Charge transfer processes resulting from differences in the electrochemical potential or other phenomena may allow modifications of doping, a variable which critically controls the electronic properties in these materials. And finally, the discontinuity in the electrostatic repulsion may give rise competition or coupling between order parameters, thus allowing to tailor the interactions which ultimately control the electronic properties. The possibility of tailoring the electronic structure of interfaces has driven an important effort towards the design of interfaces with specific functionalities for device applications. In this talk I will examine several interface problems in oxide heterostructures including the creation of interfacial magnetism due to bonding reconstruction, and effect of stabilization of novel phases at $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3/\text{La}_{0.3}\text{Ca}_{0.7}\text{MnO}_3$ interfaces with special emphasis on exploiting these effects for the design of magnetic tunnel junctions with active barriers with novel spin filtering functionalities.

Work done in collaboration with C. Carrétéro¹, Bibes¹, and A. Barthélémy¹, C. Visani², Z. Sefrioui², F. Y. Bruno², J. Garcia-Barriocanal², D. Arias², C. Leon², N. Nemes², M. Garcia Hernandez³, M. Varela⁴, S. J. Pennycook⁴, M.J. Calderón³, K. March⁶, M. Walls⁶, D. Imhoff⁶, L. Brey³,

- 1 Unité Mixte de Physique CNRS/Thales, Campus de Polytechnique, 1, Avenue A. Fresnel, 91767 Palaiseau (France) and Université Paris-Sud, 91045 Orsay (France)
- 2 GFMC, Departamento de Física Aplicada III, Universidad Complutense de Madrid, 28040 Madrid, Spain
- 3 Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (ICMM-CSIC). 28049 Cantoblanco. Madrid.
- 5 Condensed Matter Sciences Division, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee 37831-6031, USA
- 6 Laboratoire de Physique des Solides, CNRS, Université Paris-Sud, 91405 Orsay (France)

Magnetism of ordered arrays of dots and antidots

M. Vázquez, A. Asenjo and R. P. del Real

Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, CSIC; Cantoblanco, 28049, Madrid, mvazquez@icmm.csic.es

Ordered arrays of magnetic dots and antidots are of present interest for their technological applications in advanced magnetic recording media, for sensing applications after being suitably functionalized [1]. On the other hand, their magnetization process involving peculiar rotational magnetization (e.g., vortex or transverse propagation modes) in dots and nucleation/propagation domain wall displacements in antidots are of fundamental micromagnetic interest [2,3]. Here, we review aspects of interest of such arrays from preparation to magnetic behavior and functionalization.

Arrays of nanodots and antidots are fabricated by electrochemical route, which is a cost effective and reliable technique, in reproducing ordered magnetic systems. Nanodots and nanopillars of single and multilayer morphology are prepared by electroplating filling of self-assembled anodic alumina membranes used as templates (Figure 1), which geometry parameters determine the final shape of wires: 15 to 200 nm in diameter and 100 to 10.000 nm long. In all cases, the samples present hexagonal ordering with a lattice parameter between 45 and 500 nm [4]. Antidots are prepared by sputtering onto the anodic alumina membrane template. The thickness of the magnetic layer varies between 5 and 140 nm. Typical composition of dots/wires are Co-based (including Co, CoNi and CoPd), while for antidots we will focus on permalloy (Py) and Co-based compositions.

The morphology of the samples is characterized by HR-SEM (High Resolution Scanning Electron Microscopy) and AFM (Atomic Force Microscopy). The magnetization process is experimentally analyzed by VSM (vibrating sample magnetometer), MOKE (magneto-optical Kerr effect) and MFM (magnetic force microscopy, both in remanence and under externally applied magnetic fields [5]). The VSM provide the magnetization process of the whole array of nanowires, nanodots and antidots sample, while the magnetization surface is analyzed by MOKE and the nanostructures are individually imaged by MFM.

For the nanowires the magnetization process depends on the magnetocrystalline anisotropy and magnetostatic interactions among nanowires. Consequently, their magnetic response can be conveniently tuned playing with both effects,

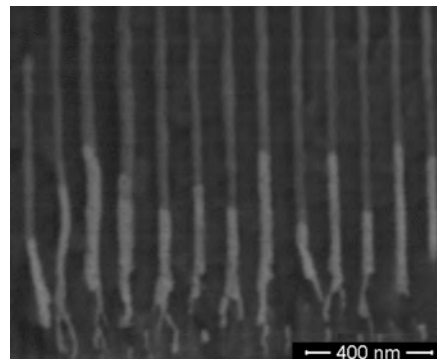


Figure 1. Cross-sectional SEM image of Au/Co50Ni50 nanowires in AAO template.

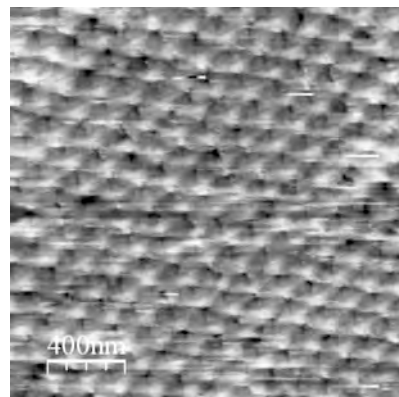


Figure 1. MFM image of a Py antidot sample obtained in remanent state.

that is, with the composition, diameter, distance among them or even the length of the nanowires [3].

In the case of the antidots, besides the magnetocrystalline anisotropy, the magnetization process depends dramatically on the ratio thickness/antidot diameter [6].

In both cases the magnetic properties are analyzed by micromagnetic simulations [3]. Functionalization possibilities are finally also described.

REFERENCES

1. Vázquez M., Asenjo A., Morales M.P., Pirola K.R., Badini-Confaloni G., and Hernández-Vélez M., Chapter "Nanostructured Magnetic Sensors", *Sensors Based on Nanostructured Materials*, F.J. Arregui (ed.), Springer Science+Business Media, LLC 183-252 (2009).
2. Jaafar M., Navas D., Asenjo A., Vázquez M., Hernández-Vélez M., García-Martín J. M., *J. Appl. Phys.* **101**, 09F513 (2007)
3. Vivas L.G., Yanes R., Chubykalo-Fesenko O. and Vazquez M., *Appl. Phys. Lett.*, in press
4. Pirola K.R., Knobel M., Hernandez-Velez M., Nielsch K. and Vazquez M., "Magnetic nanowires: Fabrication and characterization", *The Oxford Handbook of Nanoscience and Nanotechnology*, Vol II, A.V. Narlikar and Y.Y. Fu (ed.), Oxford University Press 772-824 (2010)
5. Jaafar M., Gómez-Herrero J., Gil A., Ares P., Vázquez M., and Asenjo A., *Ultramicroscopy* **109**, 693–699 (2009)
6. K.J. Merazzo, R.P. del Real, A. Asenjo and M. Vazquez, *J. Appl. Phys.* **109**, 107B906 (2011)

**Simposio especial Albert Fert
sobre espintrónica y nanomateriales**

Annealing influence on martensitic transition in Ni-Mn-In Heusler alloys ribbons

L. González¹, J. García¹, W.O. Rosa¹, V.M. Prida¹, Ll. Escoda², J.J. Suñol², V. V. Koledov³ and B. Hernando^{1,*}

¹Physics Dept., Oviedo University, Calvo Sotelo s/n, 33007 Oviedo, Spain

²Girona University, Campus Montilivi, ed. PII, Lluís Santaló s/n, 17003 Girona, Spain

³Kotelnikov Inst. Radio Engineering and Electronics, RAS, Moscow 125009, Russia

* grande@uniovi.es

Nominal Heusler $\text{Ni}_{45.5}\text{Mn}_{43}\text{In}_{11.5}$ and $\text{Ni}_{46}\text{Mn}_{42}\text{In}_{12}$ alloys have been prepared by arc-melting and produced in ribbons shape resulting in $\text{Ni}_{45.8}\text{Mn}_{42.6}\text{In}_{11.6}$ and $\text{Ni}_{45.3}\text{Mn}_{42.3}\text{In}_{12.4}$ composition, respectively, by rapid solidification using melt-spinning technique [1,2]. The as-quenched samples present an austenite-martensite structural transformation in the temperature range from 50 K up to 400 K. We report the influence either of short-time vacuum annealing, during 10 minutes at 973 K, see Fig. 1. Thermomagnetic Measurements were performed on as-quenched and annealed ribbons by a VersaLab VSM in the 50 – 400 K temperature range applying magnetic field of 50 Oe. Structural transformation is highly sensitive to annealing treatment in both samples. The annealing treatment shifts characteristic martensitic transition at higher temperatures and changes the magnetic behavior in the martensitic state, with a larger separation between field-cooling and zero-field cooling thermomagnetic curves in comparison with the as-quenched ribbons, that could be ascribed to antiferromagnetic and ferromagnetic components in the martensitic phase depending on the Mn-Mn distance.

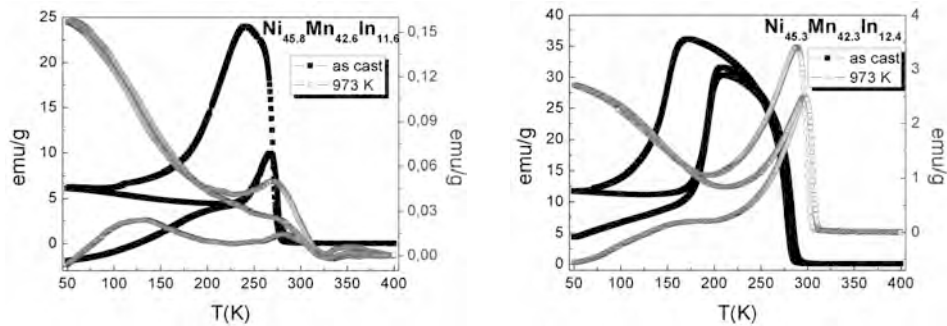


Figure 1: Zero field cooling (ZFC), field cooling (FC) and field heating (FH), $M(T)$ curves measured in the temperature interval of $50 \text{ K} \leq T \leq 270 \text{ K}$ under an applied field H of 50 Oe for as-quenched and annealed ribbons the $\text{Ni}_{45.8}\text{Mn}_{42.6}\text{In}_{11.6}$ and $\text{Ni}_{45.3}\text{Mn}_{42.3}\text{In}_{12.4}$, respectively.

- [1] Y. Sutou et al., Appl. Phys. Lett. 85 (2004) 4358.
- [2] X.G. Zhao et al., Scripta Materialia 63 (2010) 250.

Crecimiento de Micro- y nanoestructuras de Sb_2O_3 mediante el método de evaporación-deposición.

T. Cebriano¹, B. Méndez, J. Piqueras

¹. Departamento de Física de Materiales, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense Madrid, 28040 Madrid,
teresa.cebriano@gmail.com

Los óxidos semiconductores de metales nanoestructurados son un interesante objeto de estudio debido a sus diferentes aplicaciones en la nanotecnología. El trióxido de Antimonio (Sb_2O_3) ha sido utilizado como agente catalítico o retardante para combustiones, es un buen filtro UV y puede tener interesantes propiedades optoelectrónicas. El control del tamaño y morfología de las nanoestructuras supone un avance en sus aplicaciones potenciales. En el caso del Sb_2O_3 las nanoestructuras pueden crecer en diferentes fases cristalinas principalmente cúbica y ortorrómbica dependiendo del método de crecimiento y de las condiciones del mismo lo que dificulta el control del tamaño, forma y cristalinidad. En este trabajo se ha utilizado un método térmico de evaporación-deposición para la obtención de nanoestructuras de Sb_2O_3 cúbico con diversas morfologías que generalmente están formadas por conjuntos de nanopirámides. Las estructuras se han caracterizado mediante SEM, EDS, XRD así como por fotoluminiscencia y espectroscopia Raman.

Las nanoestructuras de Sb_2O_3 se han crecido mediante la evaporación de antimonio metálico en polvo situado en el interior de una barquilla de alúmina a su vez colocada en el centro de un horno tubular a 900 °C y bajo un flujo de Nitrógeno. Al no establecer condiciones de vacío tiene lugar una oxidación lenta durante el recocido. Las estructuras de óxido se han depositado en sustratos de Si a diferentes distancias de la barquilla a menores temperaturas. Las estructuras depositadas en los sustratos se han identificado mediante XRD como la fase cúbica del trióxido de antimonio. La morfología ha resultado estar muy relacionada con la temperatura del sustrato o lo que es lo mismo, con la distancia sustrato-fuente.

Las estructuras más pequeñas han sido nanopirámides con tamaños de unos 200 nm que han llegado a alcanzar tamaños de 1.2 micras (Figura 1a) y nanovarillas con secciones de centenares de nanómetros (Figura 1b) ambas, aparecen también como componentes de estructuras mayores y más complejas. La figura 2 muestra los diferentes estadios de agregación de cristales piramidales y octaédricos. Bajo unas determinadas condiciones de temperatura de sustrato se han obtenido también microesferas (Figura 3). Otro tipo de agregación se ha observado en estructuras depositadas en el mismo tubo de cuarzo a una distancia específica de la fuente, lo que indica que la temperatura en el crecimiento es un parámetro bastante crítico. Las estructuras están formadas por aglomeraciones fractales de pirámides. Un ejemplo de esto es la figura 3b.

Agradecimientos

Este trabajo está financiado por MICINN (MAT2009-7882, CSD2009-0013) y por BSCH (...)

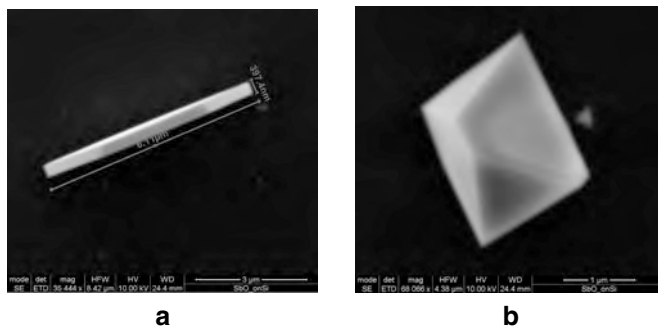


Figura 1. a) Pirámide de Sb_2O_3 and b) Nanovarilla de Sb_2O_3

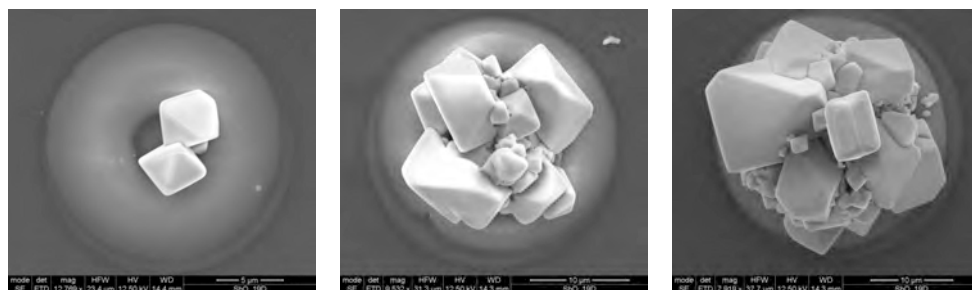


Figura 2. Diferentes fases de agregación de cristales de Sb_2O_3 principalmente con forma piramidal u octaédrica

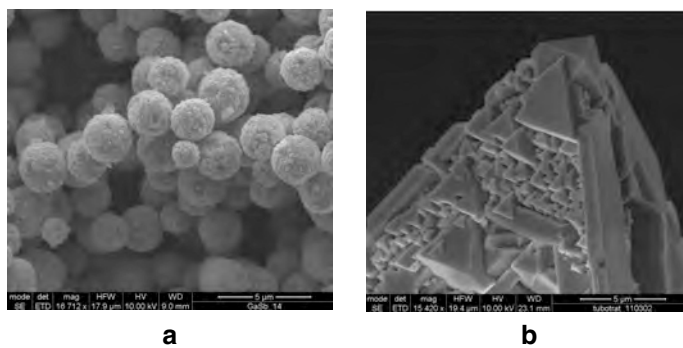


Figura 3. a) Agregado esférico nanocristalino b) Conjunto fractal de nanopirámides

Crecimiento por el método VS y caracterización luminescente de nanoestructuras de ZnS.

B. Sotillo¹, P. Fernández and J. Piqueras

Dept. Física de Materiales, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid, 28040 Madrid

¹ bsotillo@fis.ucm.es

Las nanoestructuras de semiconductores II-VI han atraído gran interés en los últimos años debido a su gran variedad de morfologías y de posibles aplicaciones. Entre las más interesantes se encuentran las aplicaciones optoelectrónicas en el rango de azul-verde, gracias a sus zanjass de energía prohibida directas. En especial, el ZnS es el semiconductor II-VI que presenta una mayor zanja de energía prohibida: 3,72eV para la fase cúbica y 3,77eV para la fase hexagonal. Esto lo convierte en un semiconductor con propiedades únicas y que puede tener aplicaciones en numerosas áreas como la óptica, la electrónica, la fotocatalisis, la biomedicina, etc [1].

En este trabajo, el método empleado para crecer las nanoestructuras es el vapor-sólido (VS), que se ha usado con éxito en otros compuestos II-VI, como el ZnO [2].

El material de partida consiste en polvos de ZnS sin moler compactados en forma de pastilla, bajo una carga compresiva de 1T. La pureza es del 99,99%. Las condiciones de temperatura, presión, flujo y gas empleado son factores que afectan en gran medida al tipo y cantidad de estructuras obtenidas. En el presente trabajo, los tratamientos térmicos se han realizado en un horno tubular horizontal en el que se ha hecho vacío hasta una presión del orden de 10^{-2} mbar. A continuación se hace pasar un flujo de gas, de manera que la atmósfera en el interior del horno se mantiene a una presión constante ya sea de Ar o de N₂. Una vez estabilizada la presión (en torno a 30mbar para Ar y 900mbar para N₂), se eleva la temperatura dentro del horno para conseguir sublimar el ZnS. El material en fase vapor se transporta, gracias al flujo de gas, hacia zonas más frías del horno, donde se deposita formando micro- y nanoestructuras. Las temperaturas de tratamiento están entre 900 y 1000°C, y la duración de los mismos es de 15 horas.

En tratamientos en atmósfera de Ar, las nanoestructuras que se logran obtener son nanohilos, aunque la densidad era baja (figura 1).

Al utilizar atmósfera de N₂ y presiones más elevadas, la variedad y densidad de micro- y nanoestructuras es mucho mayor. Las morfologías obtenidas en este caso consisten fundamentalmente en nanocintas, que puede presentar dientes de sierra o incluso evolucionar a peines; microbarras o estructuras ramificadas (figura 2).

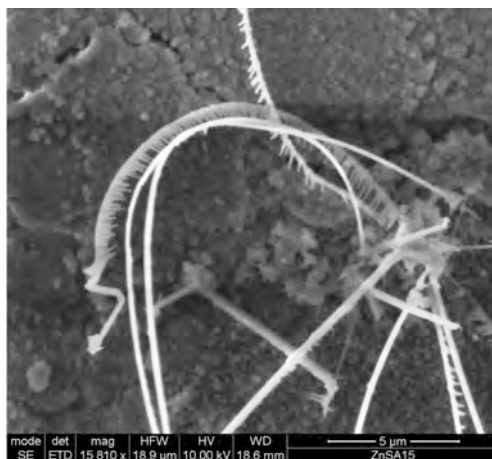


Figura 1. Nanohilos crecidos en una atmósfera de Ar a presión constante.

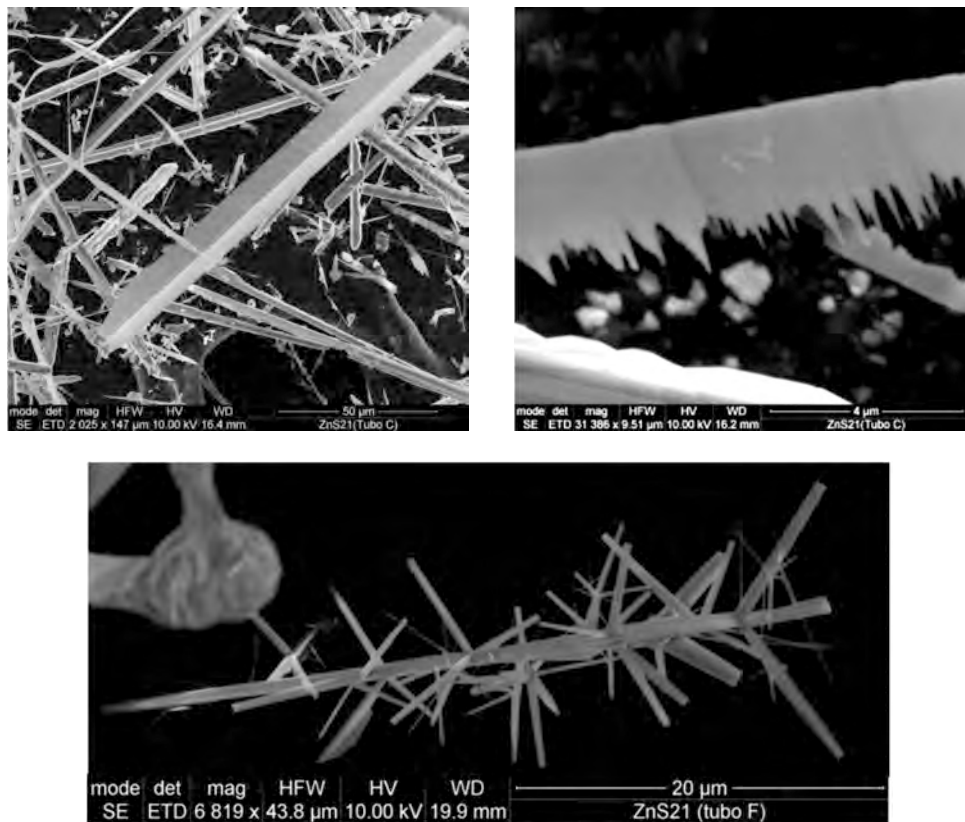


Figura 2. Micro- y nanoestructuras obtenidas en una atmósfera de N_2 .

Las propiedades ópticas de las estructuras se han estudiado mediante medidas de catodoluminiscencia y fotoluminiscencia. Además, se han realizado medidas de microanálisis de rayos X (EDX), espectroscopía Raman y difracción de rayos X.

REFERENCIAS

1. Fang, X., Zhai, T., Gautam, U.K., Li, L., Wu, L., Bando, Y., Golberg, D., *Progress in Materials Science*, **56**, 175-287 (2011).
2. Khomenkova, L., Fernández, P., Piqueras, J., *Crystal Growth and Design*, **7**, 836-839 (2007)

Crecimiento y caracterización de nano- y microestructuras alargadas de ZnO dopado con Tb

R. del Campo, A. Urbieto, P. Fernández, J. Piqueras

Departamento de Física de Materiales, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.
Ciudad Universitaria s/n 28040. Madrid. anaur@fis.ucm.es

El ZnO es un semiconductor de gran utilidad para la fabricación de diferentes dispositivos optoelectrónicos debido al valor de su zanja de energías prohibidas (3.37 eV) y su elevada energía de enlace excitónica (60 meV). En los últimos años, la fabricación de nanoestructuras de ZnO dopadas con iones de tierras raras, como el Er o el Eu, ha sido objeto de un amplio interés ya que la adición de dichos elementos modifica drásticamente las propiedades ópticas del material [1]. Dentro de las tierras raras, el ion Tb^{3+} es particularmente interesante debido a que su emisión luminiscente principal se encuentra en 544 nm, que corresponde a la longitud de onda de uno de los colores primarios.

Por otra parte, los métodos de vaporización- solidificación (VS) se pueden utilizar para la obtención de nanoestructuras alargadas de diversos materiales semiconductores, entre los que se incluye el ZnO dopado con elementos como el Mg [2] o con iones de tierras raras [3].

En este trabajo se han obtenido nano- y microestructuras alargadas con diversas morfologías de ZnO dopado con Tb. Para ello, se parte de mezclas de polvos de ZnO y Tb_4O_7 de elevada pureza sometidos a molido mecánico. Se han realizado tres mezclas diferentes con proporciones de Tb_4O_7 del 1, 5 y 10 % en peso. Tras la compactación de los polvos, las muestras se someten a tratamientos térmicos a 1270 °C durante 15 horas bajo un flujo constante de N_2 . Después de los tratamientos, se puede observar una gran cantidad de estructuras alargadas de decenas de micras de longitud y cuyos diámetros varían desde algunas micras [Figura 1(a)] hasta los cientos de nanómetros [Figura 1(b)].

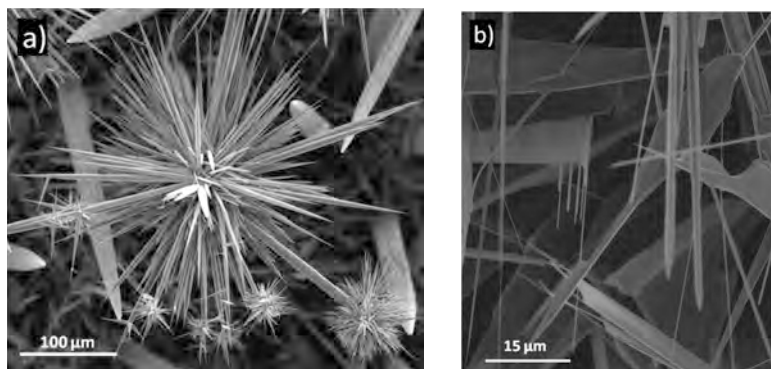


Figura 1. Imágenes de topografía adquiridas en el microscopio electrónico de barrido de las nano- y microestructuras alargadas de ZnO dopado con Tb.

Las medidas de espectroscopía de rayos X en dispersión de energías (EDS) revelan la presencia de Tb en las estructuras. El contenido de dopante varía entre el 2 y el 3% atómico en las mismas y no depende de la concentración de Tb_4O_7 en la mezcla inicial.

Por otro lado, las muestras se han caracterizado también mediante la técnica de cátodoluminiscencia (CL) en el microscopio electrónico de barrido (SEM) tanto a temperatura ambiente como a 90 K. Los espectros realizados en las estructuras muestran las emisiones típicas del ZnO con una banda intensa centrada en 3.2 eV, correspondiente al borde de banda del material, y dos bandas anchas centradas en 2.4 y 1.8 eV asociadas a la presencia de defectos. Además, se han realizado espectros de fotoluminiscencia (PL) a temperatura ambiente variando la energía de excitación. En los espectros de CL y PL se observan varias líneas de emisión relacionadas con los iones Tb^{3+} . El estudio del comportamiento de dichas emisiones luminiscentes se ha completado mediante la técnica de fotoluminiscencia de excitación (PLE).

REFERENCIAS

1. Jadwisienczak W. M., Lozykowski H. J., Xu A., Patel B., *J. Electro. Mater.* **31**, 776-784 (2002)
2. Urbieto A., Fernández P., Piqueras J., *Journal of Nano Research* **4**, 27-32 (2008).
3. Ortega Y., Fernández P., Piqueras J., *J. Nanosci. Nanotechnol.* **10**, 502-507 (2010).

Cyclic Spin Architectures Built from Carborane Radicals

J.M. Oliva¹

¹ Instituto de Química-Física "Rocasolano", Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Serrano, 119, 28006 Madrid, Spain; J.M.Oliva@iqfr.csic.es

Abstract: We present electronic structure computations on cyclic structures based on icosahedral carborane $\text{CB}_{11}\text{H}_{12}^\bullet$ radicals as building units, where the dot " \bullet " represents an unpaired electron. The building units may be directly connected through covalent cage C-B bonds or using acetylene bridge units, resulting in tricyclic structures. The combination to a total spin S in the cyclic structures allows a corresponding range of magnetic modifications. We also report low-lying excited state energies using a broken-symmetry approach combining Hartree-Fock and Density Functional Theory.

Introduction: One of the most interesting features of boron chemistry is the formation of very stable polyhedral clusters, such as the well-known icosahedral dianion $\text{B}_{12}\text{H}_{12}^{2-}$ [1]. There are plenty of derivatives from $\text{B}_{12}\text{H}_{12}^{2-}$ and a comprehensive literature citation is not possible here; thus, one can find heteroboranes - derivatives by substitution of cage atoms — derivatives with substitution in the exo hydrogens atoms, derivatives with transition-metal atoms, and also construction of linear finite 1D chains connected through covalent bonds [2]. The existence of stable radicals with formula $(\text{CB}_{11})\text{Me}_{12}^\bullet$ [3] sets the basis for the possibility of constructing molecular architectures in several dimensions with one unpaired electron per site. We have studied linear 1D chains with two [4] and three [5] cages and here we present for the first time computational studies on cyclic structures.

Triangular structures derived from $\text{CB}_{11}\text{H}_{12}^\bullet$: Cyclic structures with one unpaired electron per cage can be built using the carborane radical $\text{CB}_{11}\text{H}_{12}^\bullet$. The simplest such structure is a triangle of $\text{CB}_{11}\text{H}_{12}^\bullet$ radicals connected directly through C-B covalent bonds. Given the fact that experimentally, one needs bridge units for connecting the carborane cages [6], we will also take into account the structure with acetylene bridges. Both such triangular structures are displayed in Figure 1. There are many different ways of connecting the $\text{CB}_{11}\text{H}_{12}^\bullet$ radical to form a triangle; we have chosen the most symmetrical one for simplicity reasons, with a \hat{C}_3 axis perpendicular to both structures – Figure 1. The dot inside each cage represents again an unpaired electron.

Using the spin-projected method within density-functional theory (DFT), Table 1 gathers the energy differences between states with total spin $S = 3/2$ and $S = 1/2$. The spin-projected formalism for a

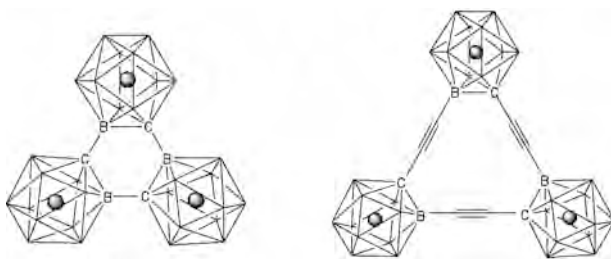


Figure 1. Three-fold cyclic structures built by joining three $\text{CB}_{11}\text{H}_{12}^\bullet$ radicals with (a) direct C-B covalent bond and (b) direct C-B bond and an acetylene bridge $\text{C}\equiv\text{C}$. The small circle inside every cage represents an unpaired. Every nonlabeled vertex in the icosahedra corresponds to a B-H moiety.

three-electron system is based on the computation of a mixed wave function with doublet and quartet spin multiplicity components [7].

$$\Delta E = E_{1/2} - E_{3/2} = 12(E_{\text{unr},1/2} - E_{3/2})/(15 - 4\langle\hat{S}^2\rangle_{\text{unr},1/2}) \quad (1)$$

Table 1 gathers the values for energy differences for the cyclic systems displayed in Figure 1, where Figure 1a and Figure 1b structures are denoted as **(I)** and **(II)** respectively.

System, Spin	Energy (au)	$\langle\hat{S}^2\rangle$	DE (eV)
(I)	-952.829852	3.76	---
(I)	-952.829762	1.76	0.004
System, Spin	Energy (au)	$\langle\hat{S}^2\rangle$	DE (eV)
(II)	-1181.351576	3.76	0.030
(II)	-1181.350845	1.75	---

Table 1. Energies (in atomic units), $\langle\hat{S}^2\rangle$ expectation values, and energy differences ΔE - Equation (1) - between high-spin (quartet) and low-spin (doublet) states for the three-fold cyclic structures **(I)** and **(II)** - Figure 1a and Figure 1b respectively. We used the UB3LYP/6-31G* method for high-spin states and spin-projected UB3LYP/6-31G* method for the low-spin states. See Refs. [] for more details.

The energy differences gathered in Table 1 give an idea of the photon energies that would be necessary in order to populate low-spin states, corresponding to the far-IR region of the electromagnetic spectrum.

Conclusions: Molecular architectures based on carborane radical units $\text{CB}_{11}\text{H}_{12}$ can be built as model systems for spin lattices in several dimensions. In this work we present preliminary results for cyclic structures, for the particular case of three-electron triangular structures with high-spin and low-spin state energies. Future directions focus on modeling larger architectural constructs in 1D and 2D, and the possibility of mapping results onto generalized model Hamiltonians.

This work was supported by the Dirección General de Universidades e Investigación de la Comunidad de Madrid under Grant No. S2009/ESP/1691 and Program MODELICO-CM and by the European Union through projects FP7-ICT-2009-4-248909-LIMA and FP7-ICT-2009-4-248855-N4E.

REFERENCES

1. Sivaev I.B., Bregadze V.I., Sjöberg S., *Collect. Czech. Chem. Commun.* **67**, 679-727 (2002)
2. Müller J., Baše K., Magnera T.F., Michl J., *J. Am. Chem. Soc.* **114**, 9721-9722 (1992)
3. Existencia $\text{CB}_{11}\text{Me}_{12}$.
4. Oliva, J.M., Serrano-Andrés, L., Havlas, Z., Michl, J., *J. Mol. Struct – THEOCHEM* **912**, 13-20 (2009)
5. Oliva, J.M., *Adv. Quant. Chem.* (2011), accepted for publication.
6. Eriksson L., Vyakaranam K., Ludvík J., Michl J., *J. Org. Chem.* **72**, 2351-2356 (2007)
7. Ovchinnikov A.A., Labanowski, J.K., *Phys. Rev. A* **53**, 3946-3952 (1996)

Desarrollo de materiales nanocompuestos poliméricos de bajo coste con prestaciones mecánicas mejoradas

C. Manteca¹, A. Yedra¹ y J. González²

¹Área Materiales Avanzados, Fundación Centro Tecnológico de Componentes (CTC), Santander 39011, (España)

²MALTA CONSOLIDER. Dept. CITIMAC, Universidad de Cantabria, Santander 39005, (España)

Introducción

El empleo de materiales compuestos poliméricos (*composites*) se ha incrementado rápidamente en todo el mundo [1-6], debido a que aportan importantes ventajas frente al uso de materiales tradicionales, como los metales, consiguiéndose mediante su formulación mejores propiedades específicas a la medida de la aplicación [2-4]. Inicialmente su uso fue en sectores tecnológicamente punteros como la aeronáutica, aunque el avance tecnológico y la disminución de costes de producción han provocado que en la actualidad su demanda venga de otros sectores como la construcción, energías renovables, automoción, deporte, naval,... [2, 4, 7]. En todos los casos existen retos/necesidades de reducir peso, tener un buen comportamiento frente ambientes agresivos y poseer altas prestaciones para garantizar su correcto funcionamiento en aplicaciones cada vez más exigentes.

El objetivo del presente trabajo ha sido desarrollar materiales compuestos termoestables multiescalares con propiedades mecánicas mejoradas, los cuales combinan refuerzos tradicionales como son las fibras de vidrio junto con nanorefuerzos consistentes en nanoestructuras carbonosas, principalmente nanotubos de carbono multipared (MWCNT's), aunque también se han empleado nanofibras de carbono (CNF's), y nanoestructuras de carbono procedentes del reciclado de neumáticos [8]. Los MWCNT's y CNF's presentan un gran potencial como materiales de refuerzo en polímeros, ya que poseen unas únicas y excelentes propiedades mecánicas, térmicas y eléctricas [9, 10], a un coste razonable y se encuentran a nivel comercial en cantidades suficientes para uso industrial [11]. Como matriz polimérica se ha empleado resina de poliéster. Estos materiales compuestos poliméricos de bajo coste con prestaciones mecánicas mejoradas con nano-refuerzos abrirán nuevas oportunidades de negocio en aplicaciones estructurales: ingeniería civil [6, 7], industria del transporte, etc.

El principal reto de este trabajo ha sido conseguir la transferencia de las excelentes propiedades de las MWCNT's a la matriz polimérica de la manera más eficiente posible. Ello implica dispersar uniformemente los nanorefuerzos de manera individual dentro de la matriz, evitando la presencia de aglomerados [2, 12]. Para ello se ha estudiado e implementado una técnica avanzada de dispersión de fibras de alta cizalla llamada molienda de tres rodillos (*Three Roll Mills*), y en algunos casos los nanorefuerzos han sido sometidos a un tratamiento químico previo para facilitar su dispersión.

Por otro lado, se ha realizado una novedosa y detallada caracterización cualitativa y cuantitativa del grado de dispersión sobre las muestras mediante diferentes técnicas: la viscosimetría, la espectroscopía RAMAN Confocal y microscopía de fuerza atómica (AFM). Finalmente se realizó una caracterización mecánica de las probetas desarrolladas.



Figura 1. Esquema de funcionamiento de la molienda de tres rodillos.

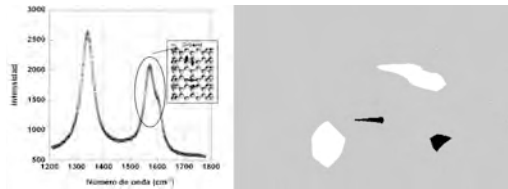


Figura 2. Mapa de distribución de los MWCNT's en la matriz (dcha.) obtenido a partir de las intensidades de los espectros RAMAN (izqda.). Zona blanca (presencia de agregados de MWCNT's): 3.8%, zona gris (presencia de MWCNT's): 95.6% y zona negra (Ausencia de MWCNT's): 0.6%.

Resultados y conclusiones

Con la técnica molienda de tres rodillos se han obtenido altos grados de dispersión de los nano-refuerzos en la matriz polimérica, siendo las proporciones empleadas de estos muy bajas: desde 0.1% hasta 1 % en peso de MWCNT's, obteniéndose buenos resultados con un 0.1% en peso. Además es un proceso relativamente sencillo, robusto y de fácil implantación industrial.

Se han obtenido mapas de distribución de los nanotubos en la matriz basados en las intensidades de los espectros RAMAN. En todas las muestras desarrolladas, el grado de dispersión de los MWCNT's es muy alto. El porcentaje de zona en la que no hay nanotubos en la muestra es siempre <3%, la zona donde existen nanotubos >90% y el porcentaje de zona que presumiblemente existen aglomerados de nanotubos es <14%. Además, se ha observado la existencia de una correlación entre el aumento de la viscosidad con el contenido en MWCNT's en la dispersión y con el grado de dispersión.

Desde el punto de vista mecánico se han mejorado las prestaciones de los prototipos desarrollados respecto al control (sin nanoreforzados). Dependiendo del contenido en MWCNT's/CNF's y los parámetros del proceso de dispersión empleados, estas mejoras pueden llegar a ser hasta un 13% en tensión de rotura (σ) y un 15% en el módulo de Young (E), en ensayos de tracción, y un 26% en σ y un 84 % en E para ensayos de flexión.

REFERENCIAS

1. Donald V. Rosato, David P. DiMattia, "Designing with plastics and composites" Ed. Van Nostrand Reinhold (1991).
2. Friedrich, Fakirov, Zhang, "Polymer composites: From Nano to Macro Scale", Springer (2005).
3. Chanda, M. and Roy S.K. *Industrial polymers, specialty polymers and their applications*. CRC Press (2007).
4. Koo, J.H. *Polymer Nanocomposites: Processing, characterization and applications*. McGraw-Hill, (2006).
5. Compañía Aries Pultrusión S.L. Web www.ariespultrusion.com
6. Compañía Strongwell. Web www.strongwell.com
7. Manteca, C., Yedra, A., Gorrochategui, I. and Miguel, R. *Estudio y análisis de fallo mecánico de paneles sándwich fabricados por Pultrusión*, XXVI Encuentro del Grupo Español de Fractura (2009).
8. Alianza NANOCIT. Web: www.nanocit.com.
9. Dresselhaus, M.S., A. Jorio, *Carbon Nanotubes: Advanced topics in the Synthesis, Structure, Properties and Applications*, Ed. Springer Science (2008).
10. Michael J. O'Connell, *Carbon Nanotubes Properties and Applications*, CRC Press (2006).
11. Compañía NANOCYL. Web: www.nanocyl.com // Compañía Grupo Antolín. Web: www.grupoantolin.com
12. Bodo Fiedler et al, *Composites Science and Technology* **66** (2006) 3115-3125.

DetECCIÓN DE NANOHILOS MAGNÉTICOS MEDIANTE UN SENSOR BASADO EN LA MAGNETOIMPEDANCIA GIGANTE

J.A. García¹, D. Lago-Cachón², J.C. Martínez-García³, M. Rivas⁴, N. Fleitas⁵

¹Departamento de Física, Campus de Viesques, Universidad de Oviedo, España; joseagd@uniovi.es.

²Departamento de Física, Campus de Viesques, Universidad de Oviedo, España; lagodavid@uniovi.es.

³Departamento de Física, Campus de Viesques, Universidad de Oviedo, España; jcmg@uniovi.es.

⁴Departamento de Física, Campus de Viesques, Universidad de Oviedo, España; rivas@uniovi.es.

⁵Departamento de Física, Facultad de Ciencias Naturales, Universidad de Oriente, Cuba; fleitas@cnt.uo.edu.cu.

El presente trabajo forma parte de otro más amplio en el que se está desarrollando un sensor de campos magnéticos débiles que sea capaz de detectar y cuantificar nanoestructuras magnéticas como nanopartículas y nanohilos. Dichas nanoestructuras se están utilizando en el mismo proyecto como marcadores magnéticos para diagnóstico precoz de enfermedades, ya sean oncológicas o de tipo vírico o bacteriano.

El sensor se basa en la MagnetoImpedancia Gigante (MIG) de cintas amorfas magnéticamente blandas fabricadas por enfriamiento ultrarrápido. Se han fabricado para este trabajo cintas de composición $\text{Co}_{70}\text{Si}_{15}\text{B}_{10}\text{Fe}_5$, que presentan una excelente sensibilidad en la detección de campos magnéticos débiles, así como buenas propiedades mecánicas.

En el estudio que se presenta aquí se analizaron dos diseños distintos para la detección de campos magnéticos débiles. El primero de ellos es un circuito I-V (Intensidad-Voltaje) donde se mide directamente la variación de la impedancia producida por el campo magnético externo. El segundo consiste en un puente de Wheatstone con dos cintas amorfas y dos resistencias no inductivas, cuyo desequilibrio se ve modificado por el campo magnético aplicado como consecuencia de la variación de las impedancias de las cintas. Robustez, bajo coste de producción y facilidad de mantenimiento también fueron considerados en el diseño de dichos circuitos.

Para analizar la respuesta de los diseños propuestos se utilizaron nanohilos de níquel embebidos en las membranas nanoporosas en las que fueron fabricados. La presencia de nanohilos se detecta en el método I-V como una variación de la impedancia, cuyo signo depende de la orientación de la membrana relativa a la cinta, como se muestra en la Fig. 1. Utilizando la señal magnética de los nanohilos como patrón se comprueba que el diseño basado en el puente de Wheatstone es más adecuado para la aplicación deseada debido a su mayor sensibilidad.

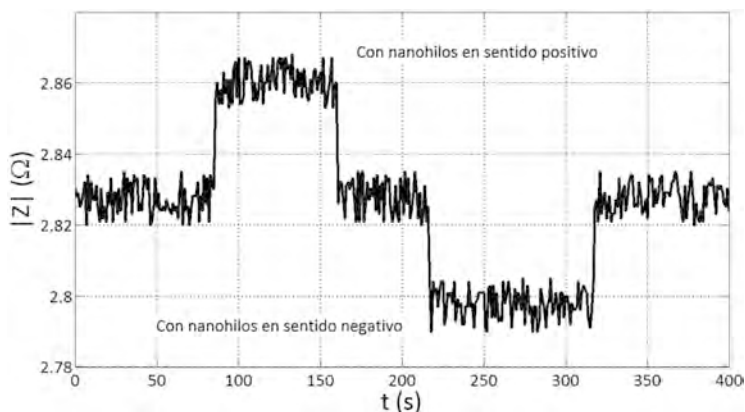


Figura 1. Medida continua de la impedancia donde se observa una variación de su valor atribuible a la presencia de los nanohilos. Obsérvese que el valor depende de la orientación de la membrana de nanohilos.

Efecto Aharonov-Bohm en excitones confinados en anillos cuánticos bidimensionales

C. González-Santander^{1(a)}, F. Domínguez-Adame¹ y R. A. Römer²

¹Departamento de Física de Materiales, Universidad Complutense de Madrid, 28040 España

²Department of Physics, University of Warwick, Coventry, CV4 7AL, Reino Unido

^(a) Correo electrónico: cglezsantander@fis.ucm.es

Los últimos avances en la fabricación de anillos y puntos cuánticos mediante técnicas de autoensamblado, litografía o ataque químico han propiciado el desarrollo de un área muy activa de investigación tanto experimental como teórica. En este tipo de nanosistemas los electrones y los huecos están confinados en regiones de tamaño inferior al radio de Bohr y, por tanto, la interacción de Coulomb es más relevante. La posible existencia de estados ligados de pares electrón-hueco ofrece una oportunidad única para analizar el efecto Aharonov-Bohm (AB) en excitones generados en anillos cuánticos. Se ha demostrado que, a pesar de que el excitón es una cuasi-partícula neutra, es sensible al flujo magnético que atraviesa el anillo cuántico debido a que su extensión es comparable al tamaño del anillo cuántico [1]. En los experimentos este efecto se traduce en un comportamiento oscilatorio de la energía de ligadura y la fuerza de oscilador al variar el flujo magnético. Los estudios sobre el efecto AB en excitones en anillos bidimensionales (2D) [2,3] predicen que éste desaparece al incrementar la anchura del anillo. Sin embargo, recientemente, diferentes experimentos han mostrado oscilaciones en la energía de ligadura de excitones en anillos 2D [4,5] que podrían explicarse a través del efecto AB.

En este trabajo proponemos un modelo donde el potencial de confinamiento para los portadores permite estudiar progresivamente el paso de sistemas unidimensionales (1D) a 2D. Este potencial presenta simetría axial y es singular en el origen [6]. En la Fig. 1 se puede observar este potencial para distintos valores del parámetro $\gamma = R/W$, que da cuenta de la relación entre el radio R y la anchura W del anillo. Con el fin de estudiar el efecto AB, el anillo está atravesado por un flujo magnético Φ (en unidades del cuanto de flujo $\Phi_0 = h/e$). Asumimos que la interacción electrón-hueco es de corto alcance $v_0 \delta(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h)$, donde $v_0 < 0$ proporciona la intensidad de la atracción. Las funciones de onda y energías de los portadores confinados en ausencia de interacción de Coulomb se obtienen de forma analítica y la función de onda para el excitón se puede escribir, por tanto, como combinación lineal de aquellas. A partir de la ecuación de Schrödinger para el par electrón-hueco se obtiene una expresión compacta para la energía del excitón. La Fig. 2 muestra las oscilaciones AB en la energía del excitón, Δ , en función del flujo magnético para diferentes configuraciones de anillos 2D e intensidades de interacción. Puede comprobarse que las oscilaciones AB se observan para valores de γ en el rango de 0.5 a 10. Para $\gamma = 10$ recuperamos los resultados obtenidos para anillos

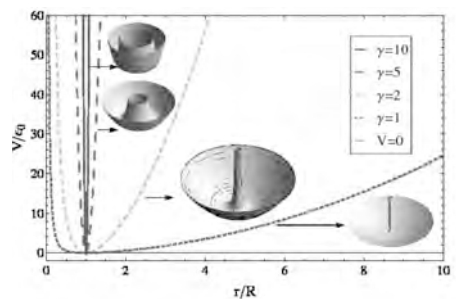


Figura 1. Dependencia radial del potencial de confinamiento para distintos valores del parámetro $\gamma = R/W$.

1D, indicando que en estas condiciones la anchura del anillo es despreciable frente a su radio. En cambio, cuando la anchura es del orden del radio o incluso mayor ($\gamma = 0.5$), las oscilaciones se mantienen. El mismo efecto puede observarse en la fuerza del oscilador, como se muestra en la Fig. 3.

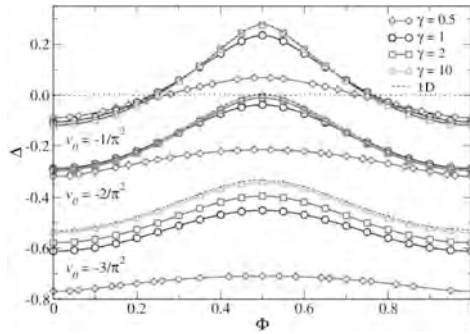


Figura 2. Energía del excitón en función del flujo magnético para distintas intensidades de interacción v_0 y $\gamma=R/W$.

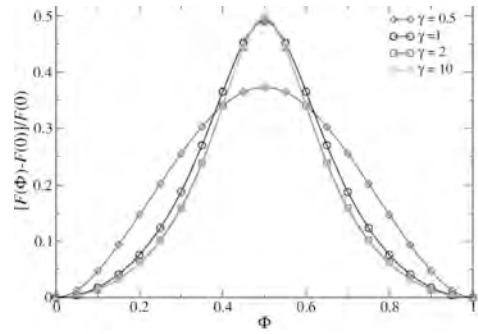


Figura 3. Fuerza de oscilador normalizada en función del flujo magnético cuando $v_0 = -2/\pi^2$, para distintos valores del parámetro γ .

En la Fig. 4 presentamos la densidad de probabilidad del excitón en función de las coordenadas radiales $\rho_e = r_e/R$ y $\rho_h = r_h/R$. Para obtenerla se ha integrado en las variables angulares. De esta figura se desprende que el excitón está realmente confinado en la región del anillo y se extiende en toda su anchura. Estos resultados concuerdan muy bien con los obtenidos experimentalmente en la Ref. [4], donde estudian anillos con $\gamma \sim 1$. Por tanto, nuestro estudio sugiere que el efecto AB permanece prácticamente intacto cuando los portadores están confinados en anillos 2D con la geometría indicada en la Fig. 1.

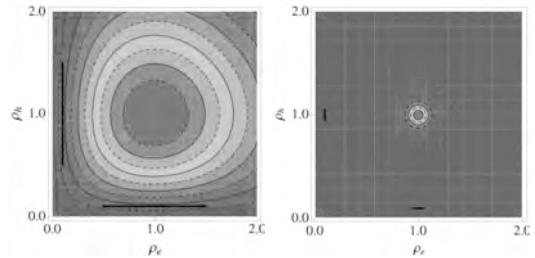


Figura 4. Dependencia de la densidad de probabilidad en las coordenadas radiales, para (a) $\gamma = 1$ y (b) $\gamma = 10$. Las líneas negras indican la anchura del anillo en cada caso.

REFERENCIAS

1. Römer R. A., Raikh M. E., *Phys. Rev. B* **62**, 7045 (2000).
2. Hu H., Zhu J., Li D., Xiong J., *Phys. Rev. B* **63**, 195307 (2001).
3. Song J., Ulloa S. E., *Phys. Rev. B*, **63** 125302 (2001).
4. Teodoro M. D., *et al.*, *Phys. Rev. Lett* **104**, 086401 (2010).
5. Ding F., *et al.*, *Phys. Rev. B* **82**, 075309 (2010).
6. Tan W.-C. y Inkson J. C., *Semiconductor Science and Technology* **11**, 1635 (1995).

Efecto Doppler rotacional en la resonancia magnética

S. Lendínez¹, E. M. Chudnovsky², J. Tejada¹

¹Departament Física Fonamental, Facultat de Física, Universitat de Barcelona; sergi.lendi@ubxlab.com.

²Physics Department, Lehman College, The City University of New York.

El término efecto Doppler rotacional (RDE) se usa para describir un desplazamiento en la frecuencia de una onda electromagnética observada por un receptor que está en rotación relativa al emisor. En este caso, una onda polarizada circularmente de frecuencia ω que se propague en la dirección de rotación relativa, de valor Ω , entre emisor y receptor será percibida por el receptor como una onda de frecuencia $\omega \pm \Omega$, donde el signo depende de la dirección relativa de giro entre emisor y receptor, como se muestra en la configuración de la Figura 1.

Un rápido análisis de esta configuración en el caso de un receptor con una resonancia magnética llevaría a la conclusión que el desplazamiento de la frecuencia resonante de un objeto rotatorio es igual a Ω . Sin embargo, debido a que la rotación mecánica de un sistema de cargas es equivalente a un campo magnético, hay que considerar también el desplazamiento de la frecuencia resonante del receptor debido al efecto de dicho campo. En el caso de receptores basados en circuitos LC, como podría ser una antena, esta frecuencia es insensible a la acción de un campo magnético con lo que la frecuencia sí se vería desplazada Ω ; pero para un receptor basado en una resonancia magnética, ésta se vería afectada por la rotación, haciendo el razonamiento inválido en este caso.

Así, en primera aproximación podríamos escribir la frecuencia resonante afectada por el efecto Doppler rotacional como $\omega'_{res} = \omega_{res} \pm \kappa\Omega$ donde κ tiene una expresión diferente según el tipo de resonancia magnética.

En la Tabla 1 se han resumido las expresiones obtenidas para κ en cada resonancia, así como los supuestos y definiciones usadas y el Hamiltoniano resuelto de cada sistema. Cabe destacar que para tener un efecto observable, la frecuencia de la onda electromagnética incidente vista por el sistema rotatorio tiene que ser igual a la frecuencia de resonancia en este sistema, satisfaciéndose la igualdad $\omega' = \omega'_{res}$.

Este hecho hace que, si $\kappa = 1$, no haya desplazamiento. Analizando con más detalle las expresiones de κ de cada tipo de resonancia observamos que en el caso de ESR, $\kappa = 1$ si el eje de rotación coincide con uno de los ejes principales, cosa que en NMR ocurre si la interacción hiperfina es isotrópica. En el caso de NMR, además, $\kappa \rightarrow 1$ en cualquier caso cuando $B \gg B^{hf}$, es decir para campos grandes. En el caso de FMR, la condición de campos grandes es $B \gg \mu_0 M_0$, con el mismo efecto. En FMR, además, es necesaria una asimetría en el elipsoide ($N_x \neq N_y$). Vemos, pues, que en los tres casos es imprescindible una asimetría en el sistema.

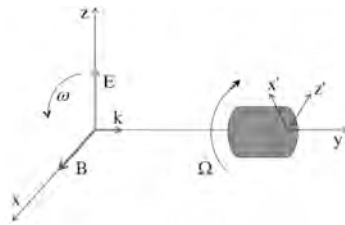


Figura 1. Esquema del efecto Doppler rotacional, donde se muestra un sistema de coordenadas ligado a la onda electromagnética polarizada circularmente que se propaga en la dirección y , con frecuencia ω . El sólido gira con frecuencia Ω . En el sistema de coordenadas del receptor, se observa la onda electromagnética con frecuencia $\omega' = \omega \pm \Omega$ dependiendo de la dirección de giro.

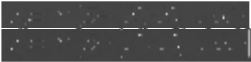



	ESR	NMR	FMR
Supuestos y definiciones	Eje de rotación Ω paralelo a campo externo \mathbf{B} . Sistema de referencia rotatorio con los ejes principales característicos.		
	g_{ij} : tensor giromagnético \mathbf{n} : vector unitario en la dirección del eje de rotación	Además $\langle \mathbf{S} \rangle$ paralelo a \mathbf{B} i Ω .	Elipsoide uniformemente magnetizado.
		Orden ferromagnético en el sólido.	
		Interacción hiperfina anisotrópica.	
\mathcal{H}	$\sum_{i,j=x,y,z} \frac{1}{2} \mu_B g_{ij} \sigma_{ij} B_j - \frac{1}{2} \hbar \sigma$	$-\gamma_n g_n \mathbf{I} \cdot \mathbf{B} - \sum_{i,j=x,y,z} A_{ij} I_i \langle S_j \rangle -$	$-\mu_0 \left[\mathbf{M} \cdot \mathbf{H} + \frac{1}{2} (N_x - N_z) M_x^2 \right]$
κ			

Tabla 1. Expresión de κ , hamiltoniano H y supuestos usados para obtenerla para las resonancias magnéticas de spin electrónico (ESR), nuclear (NMR) y ferromagnética (FMR).

Si la onda electromagnética incidente está polarizada linealmente, tendrá tanto la componente levógira como dextrógira. Sin embargo, en ESR y FMR en condiciones de simetría rotacional, solo una componente tendrá los fotones adecuados para producir la transición resonante. Si la simetría se rompe, ambas componentes podrán ser absorbidas, con lo que aparecerán dos picos separados una distancia 2Ω , como se observa en la Figura 2 para el caso de FMR.

En resumen, para poder observar el efecto deben cumplirse los siguientes requisitos:

- Onda polarizada circular o linealmente.
- La simetría rotacional debe romperse.
- Frecuencia de rotación comparable al ancho de banda (realizable en NMR)
- Posibilidad de resolver la posición del pico con resolución comparable a la frecuencia de rotación (realizable en ESR y FMR)

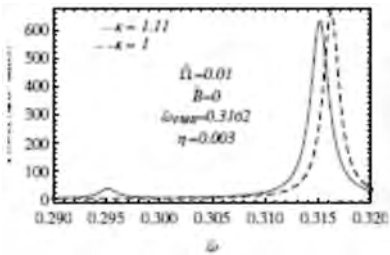


Figura 2. Potencia absorbida por un ferromagneto. Se observa como, a medida que se rompe la simetría, el pico principal se desplaza y además aparece un segundo pico separado 2Ω .

REFERENCIAS

1. Lendínez, S., Tejada, J., Chudnovsky, E.M., *Phys. Rev. B*, **82**, 174418-1 – 174418-8 (2010).

Electronic correlations at the surface of insulating oxides

Andrzej Kedzior, Jichao Li and M.Carmen Muñoz

Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Cantoblanco, 28049 Madrid, Spain; mcarmen@icmm.csic.es

A two-dimensional electron gas (2DEG) has been recently observed at the (001) SrTiO₃ surface. The metallic state formed at the vacuum cleaved surfaces shows universal subbands independently of bulk carriers densities and was found even in non-doped insulating samples [1]. Furthermore, the formation of the 2DEG and the control of the electron density, up to $8 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, have been realized by exposure of the bare SrTiO₃ surface to intense ultraviolet light [2]. Here we develop a theoretical approach to investigate electronic correlations on the electronic properties of inhomogeneous systems as surfaces, interfaces or nanostructures and apply the method to study the 2DEG formed at the (001) SrTiO₃ surface. In our approach, we combine density-functional calculations (DFT) with a dynamical treatment of the strongly interacting Ti *d* electrons. Dynamical correlations are treated through a green function method, which allows an efficient application of the dynamical mean-field theory to inhomogeneous systems, such as the semi-infinite SrTiO₃ surfaces. First, we have investigated the origin of the 2DEG using ab-initio DFT calculations considering electronic and atomic reconstructions. We show that the 2DEG has an extrinsic origin since oxygen vacancies localized at the surface region behave as donor-like defects and provide the dopant electrons. From the stable structure of the DFT calculations, we derive an effective hamiltonian for the *d* states of Ti forming the conduction band minimum. The dynamical treatment is applied to the effective *d* states Hubbard model. We show that dynamic correlations are strongly dependent on the orbital symmetry and discuss how many-body interactions affect the dimensionality, localization, spatial extend and electron mobility of the 2DEG.

1. F. Santander-Syro et al., Nature 469, 189 (2011)
2. W. Meevasana et al., Nature Materials 10 , 114 (2011).

Estudio de un sensor magnetorresistivo lineal basado en tecnología válvula de espín

J. Sánchez¹, D. Ramírez¹, S. Cardoso², P. Freitas².

¹Departamento Ingeniería Electrónica, Universidad de Valencia; España. Jaime.sanchez@uv.es.

²Instituto de Sistemas e Computadores – Microsistemas e Nanotecnologias and Institute for Nanosciences and Nanotechnologies (INESC-MN), Lisboa, Portugal

El efecto magnetorresistivo (MR) es el cambio de resistencia eléctrica de un conductor cuando éste es sometido a un campo magnético externo. Este fenómeno se conoce desde 1856 (L. Kelvin) como efecto MR ordinario. En 1988 dos grupos de investigación experimentaron con materiales donde el efecto MR se manifiesta con mayor intensidad, y en reconocimiento a su aportación A. Fert y P. Grünberg recibieron el Premio Nobel de Física en el año 2007 por el descubrimiento del efecto magnetorresistivo gigante (GMR).

El término “giant” fue el calificativo empleado por el grupo de Fert [1] en su primera publicación para describir la magnitud del efecto MR observado (45%) comparado con los ratios ofrecidos en la época (3%). El grupo de Grünberg [2] empleó el calificativo “strong”, quizás porque los ratios MR de sus experimentos fueron inferiores (10%).

El efecto GMR se observa en estructuras multicapa nanométricas donde dos capas ferromagnéticas (FM) son separadas por una capa no ferromagnética (NFM). Las capas FM actúan como válvulas de espín: sus vectores de magnetización determinan qué electrones son más fáciles de transmitir espín+ o espín-. Cuando las dos capas están en reposo presentan una configuración antiparalela y por tanto ofrecen una resistencia de alto valor, en cambio un campo magnético externo puede girar los vectores de magnetización hasta conseguir una configuración paralela de baja resistencia. El nombre GMR a veces se intercambia con el término válvula de espín [3], sin embargo el término válvula de espín hace referencia a unas determinadas estructuras GMR.

Partiendo de la estructura básica descrita con anterioridad, el resto de estructuras evolucionaron intentando mantener bloqueado el vector de magnetización de una de las capas FM (capa inmóvil), mientras que el vector de magnetización de la otra capa FM es sensible al campo magnético externo (capa libre). Las estructuras denominadas válvulas de espín se caracterizan por bloquear fuertemente la capa inmóvil mediante una lámina antiferromagnética (AFM) adyacente. Para aplicaciones lineales, los vectores de magnetización de la capa inmóvil y libre se disponen ortogonalmente.

Propuesta de diseño, fabricación y caracterización experimental de un sensor de válvula de espín.

La estructura multicapa empleada en el diseño del sensor fabricado en este trabajo se puede ver en la figura 1. La capa libre está formada por Cu, NiFe y CoFe. La capa inmóvil está formada por CoFe, MnIr (lámina AFM) y NiFe. En la capa libre, la lámina de CoFe se inserta con dos intenciones: la interfase CoFe/



Figura 1. Estructura multicapa del sensor de válvula de espín propuesto (espesor en Å).

Cu proporciona altos ratios de GMR, y actuar como barrera de difusión para el NiFe y el Cu. En la capa inmóvil, la lámina de CoFe se introduce como interfase para evitar malformaciones cristalinas. La capa inmóvil se debe al campo de acoplamiento de intercambio directo entre la lámina de material AFM (MnIr) y la lámina de material FM (CoFe). A pesar de la existencia de una capa NFM, lámina separadora (Cu), existe un acoplo ferromagnético indirecto entre las dos capas que debe ser todo lo débil posible para que el vector de magnetización de la capa libre pueda girar sin dificultad. Este acoplamiento está controlado por la espesura de la capa separadora. En la parte superior e inferior de la estructura de la válvula de espín se ha introducido una capa de Ta para mejorar la textura de la superficie de deposición de las capas FM. Por último se añadió una capa de TiW(N₂) en la parte superior que actúa como una capa de pasivación previniendo la oxidación.

Los sensores fueron fabricados en las instalaciones del INESC-MN. La válvula de espín fue depositada sobre un sustrato de Silicio (100) más una capa adicional de Al₂O₃. La deposición de la estructura multicapa se realizó mediante deposición por rayo iónico (Ion Beam Deposition, IBD) usando la máquina Nordiko 3000. Los sensores con un tamaño de 3 μm x 150 μm fueron definidos mediante litografía (Direct write laser lithography, DWL) y revelados eliminando el material fotorresistivo (lift-off). Adicionalmente se depositaron (máquina Nordiko 7000) y definieron los contactos de AlSiCu con un espesor de 3000 Å.

Los sensores fueron caracterizados físicamente para un campo magnético de ± 150 Oe. La curva de transferencia magnética se puede ver en la figura 2. Para una población de 32 sensores observamos una resistencia nominal de 822 Ω , un efecto MR típico del 8,2% y una sensibilidad de 0,089 %/Oe para un rango lineal de ± 25 Oe. La figura 3 representa el histograma de efecto MR obtenido experimentalmente donde se observa una incertidumbre tipo A del 4%.

Especial agradecimiento al Ministerio de Ciencia e Innovación y a todo el personal técnico perteneciente al INESC-MN.

REFERENCIAS

1. Albert, F., *Physical Review Letters*, volumen 61, 2472-2475 (1988).
2. Binasch G., Grunberg P., Suarenbach F., Zinn W., *Physical Review Letters*, volumen 39, 4828-4830 (1989).
3. Coehoorn R. (2003). Handbook of magnetic materials, volumen 15, Giant magnetoresistance and magnetic interactions in exchange-biased spin-valves. Elsevier, 1-197.

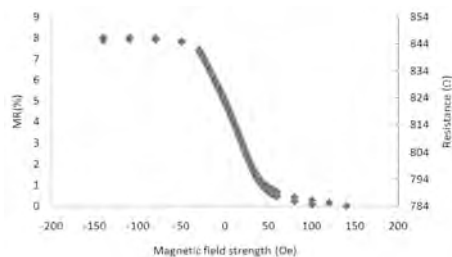


Figura 2. Curva magnética experimental de uno de los elementos de válvula de espín fabricados.

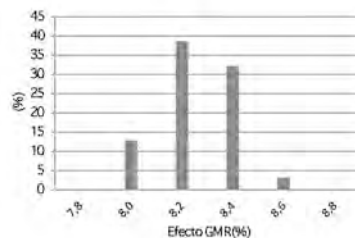


Figura 3. Histograma del efecto GMR experimental.

Evolución con la temperatura del factor de potencia termoeléctrico en películas delgadas de sulfuros metálicos

J. M. Clamagirand¹, J.R. Ares, I.J. Ferrer, C. Sánchez

¹ Grupo Mire, Departamento Física de Materiales, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid; 28409, Madrid, josemanuel.clamagirand@uam.es.

Introducción

El efecto termoeléctrico permite la conversión directa de calor en energía eléctrica, lo que resulta muy atractivo para aumentar el rendimiento en el gran número de sistemas que producen un elevado calor residual (motores de combustión, sistemas de aire acondicionado).

Sin embargo, la baja eficiencia actual ($< 5\%$) [1] de los dispositivos basados en esta fenomenología limita su implementación en diferentes aplicaciones. La eficiencia está relacionada con la figura de mérito de los materiales termoeléctricos ($ZT = S^2/\rho\kappa$). Es necesario pues, para aumentar la eficiencia del dispositivo, aumentar la figura de mérito a través de los valores de los parámetros que la componen (resistividad eléctrica (ρ), coeficiente termoeléctrico (S) y conductividad térmica (κ)).

Entre los diferentes compuestos investigados en la actualidad con este fin, los sulfuros metálicos son muy prometedores debido a su gran variedad, relativamente altas figuras de mérito y bajo coste [2]. Además, la facilidad de síntesis en forma de película delgada ofrece un excelente marco, tanto para estudiar la influencia de parámetros microestructurales (tamaño de cristalito, tensiones, etc), como los efectos de dimensionalidad en las propiedades de transporte electrónico y térmico.

En este trabajo se ha investigado la influencia de la temperatura en un rango cercano al ambiente ($RT - 473\text{ K}$) en las propiedades eléctricas y estabilidad de películas delgadas de diferentes sulfuros metálicos (CoS_2 , FeS_2 , PdS , NiS_2 , CuS). Con este fin se ha medido el factor de potencia ($\alpha = S^2/\rho$) de las diferentes películas delgadas de sulfuros. Las películas se prepararon mediante evaporación térmica de los diferentes metales. El proceso de sulfuración se realizó a través de una reacción sólido-gas a $T = 673\text{ K}$. Las muestras se caracterizaron mediante perfilometría, DRX y EDX-SEM. Las medidas de resistividad y coeficiente termoeléctrico se realizaron mediante el método diferencial en sistemas experimentales construidos en nuestro laboratorio [3].

Resultados y discusión

La Tabla 1, muestra las propiedades de transporte a temperatura ambiente de los metales sulfurados. En todos los casos se detecta una única monofase policristalina de un sulfuro metálico. Se observa el carácter semiconductor de FeS_2 , PdS y NiS_2 y metálico de CoS_2 y CuS , lo que determinará el comportamiento de sus propiedades de transporte con la temperatura.

Metal	Fases (XRD)	$d_{\text{gr}}(\text{nm})(\pm 5)$	$r(\text{Wcm})$	$S(\text{mV/K})$
Fe	FeS_2	205	1.99E-01	67.4
Pd	PdS	64	6.60E-02	-143.7
Co	CoS_2	268	3.78E-04	-47.1 ± 5
Ni	NiS_2	230	1.69E-01	14.0
Cu	CuS	317	7.05E-04	10.7

Tabla 1. Fases cristalinas presentes en metales sulfurados y sus correspondientes espesores, resistividades (Método de Van der Pauw) y coeficientes termoeléctricos a Temperatura ambiente.

La Fig. 1 muestra el voltaje generado por una diferencia de temperatura entre los extremos de la película de PdS. La pendiente de la recta obtenida determina el valor del coeficiente Seebeck i.e. $-143,7 \mu\text{V/K}$ indicando su carácter semiconductor. El carácter negativo refleja que el portador mayoritario son electrones. Se ha investigado la evolución del factor de potencia de los diferentes sulfuros con la temperatura, observándose diferentes comportamientos según el sulfuro investigado. Por ejemplo, en la Fig. 2 se muestra el comportamiento del factor de potencia con la temperatura de la película sulfurada de hierro. Se observa como se duplica el factor de potencia al aumentar la temperatura, indicando la mejora de las propiedades termoeléctricas del FeS_2 . Este tipo de comportamiento de la figura de mérito es el esperable en compuestos semiconductores (tal como sucede en NiS_2 , PdS) debiéndose, principalmente, a la disminución de la resistividad con la temperatura. Esta dependencia será comparada con la observada en el resto de sulfuros metálicos (PdS , CuS , etc.) y se discutirá, tanto las diferencias entre los mismos, como con los resultados de muestras en volumen existentes en la literatura.

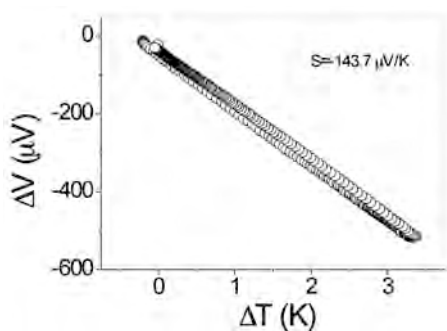
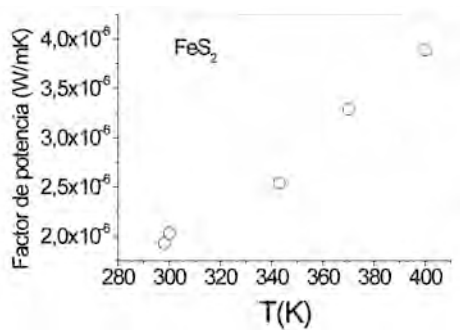
Fig. 1. Curva ΔV vs ΔT de PdS

Fig. 2. Evolución Factor de Potencia con T

REFERENCIAS

1. Ver por ejemplo D.M. Rowe, (1995) Handbook of Thermoelectricity: Macro to Nano. CRC Boca Raton.
2. Pascual A, Ares J.R., Ferrer I.J., Sánchez C. (2003). 22th Conference of Thermoelectrics p.376-379.
3. Ares J.R, León M, Celis P, Arozamena N.M., Sánchez-Páramo J., Ferrer I.J. and Sánchez C. *J. Phys. Condensed Matter*, **10(19)**, 4281 – 4289 (1996)

Excess specific heat in nanocrystalline metals

D P Rojas^{1,2}, L Fernández Barquín², J Rodríguez Fernández², L Rodríguez Fernández³
and J. Gonzalez⁴

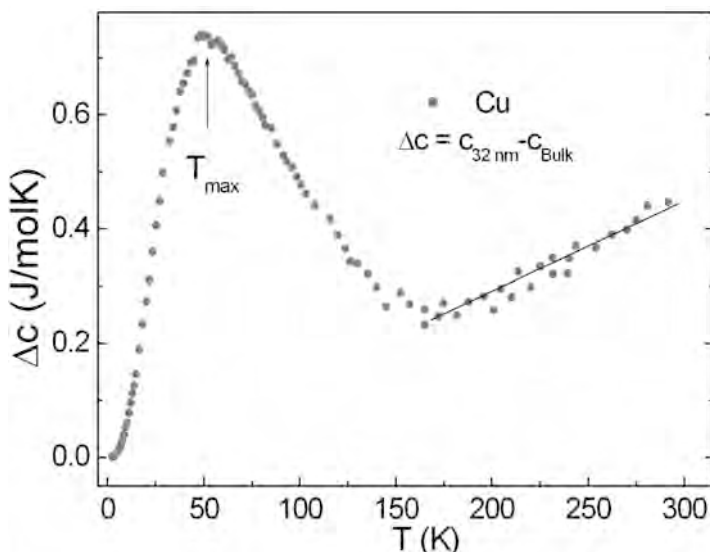
¹ Departamento de Física, Universidad Carlos III de Madrid, 28911 Leganés, Spain

² CITIMAC, Facultad de Ciencias, Universidad de Cantabria, 39005 Santander, Spain

³ SERMET-SCTI, Universidad de Cantabria, 39005 Santander, Spain

⁴ MALTA CONSOLIDER TEAM, Facultad de Ciencias, Universidad de Cantabria,

Among the techniques used to characterize nanometric systems, it is clearly upsetting the lack of specific heat data considering that this magnitude provides information on the phonon state (acoustic and thermal properties), the electronic state (in metals), and eventually, on the magnetic state. Consequently, we think that our data provide a general review in this topic in straightforward substances, which have not been fully analyzed. In this work, we present the results of specific heat measurements in the temperature range 2 – 300 K, on bulk and nanocrystalline metals Fe, Cu, Ni; and LaAl₂ alloy. An excess specific heat Δc is detected. As expected from theoretical models, in addition to high temperature slope increase, a peak at low temperatures is observed (T_{\max}). The experimental data is also supported by TEM and XRD evidence. In this sense the results presented in this work certainly will be of interest for a wide scientific community.



Interaction of Fe clusters with finite zigzag single wall carbon nanotubes from first principles calculations

F. I. Horga¹, A. Mañanes¹, M. J. López² and J. A. Alonso²

¹Departamento de Física Moderna, Universidad de Cantabria; angel.mananes@unican.es.

²Departamento de Física Teórica, Atómica y Óptica, Universidad de Valladolid; maria.lopez@fta.uva.es.

We investigate the magnetic properties of iron nanowires encapsulated on carbon nanotubes (CNTs), performing “ab initio” calculations based on density functional theory [1] using the ADF code [2].

These systems have been synthesized, and their structural and magnetic properties analyzed, due both to their fundamental and technological interest. Iron-filled nanotubes [3] have potential use in nanobiomedicine, or in spintronic nanodevices [4], or they can be used as probes for magnetic force microscopy [5]. See the recent reviews on the preparation of inorganically filled carbon nanotubes [6]. In general, free metallic magnetic nanoparticles are oxide-coated at experimental conditions; when encapsulated within carbon nanotubes, the carbon coating ensures that the metal is retained in a reduced state with its magnetic properties preserved [7].

As a model for the CNT encapsulated iron nanowires we consider an elongated isomer of the cluster Fe_{12} located inside two different finite pieces of single walled zigzag carbon nanotubes (ZNTs) of indexes (10,0) and (11,0). We present here the structural and magnetic properties of the Fe cluster-ZNT composites compared with those of the isolated systems.

The properties of ZNTs have been analyzed elsewhere [8]. The elongated structure found as a local minimum for Fe_{12} presents a strong ferromagnetic coupling with total spin, $S=19$. The magnetic moment per atom is smaller than for the free atoms, but larger than the corresponding to bulk iron. The electronic structure has a large electronic gap for the majority spin of 0.82 eV, and a much lower one for the minority spin, 0.09 eV. The minority spin presents a large density of states around the Fermi level, in agreement with previous calculations.

When the iron aggregate interacts with the nanotubes it distorts slightly from its free geometry, and its optimal position inside the tube is not at the tube axis but close to the carbon wall. We found a decrement in the total magnetic moment: $S=19$ in the free Fe_{12} and $S=18$ in the combined systems, $\text{Fe}_{12}@(11,0)$ and $\text{Fe}_{12}@(10,0)$. In both systems, the gap for the majority spin (a) is again noticeable, and that of the minority spin (b) smaller, but slightly larger than the equivalent one in the free Fe cluster.

The magnetic moments of those iron atoms which are closer to the carbon atoms are smaller than in the free aggregate. This is mainly due to the internal redistribution of the charge from majority to minority spin, and, to a much lower extent, to the depletion of the majority spin states at the iron aggregate due to a small charge transfer from Fe atoms to the carbon nanotube. Most of the majority spin density is located on the iron atoms.

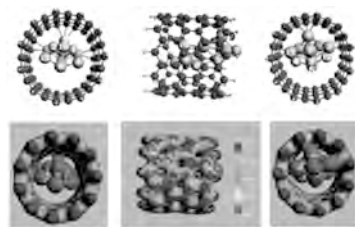


Figure 1. Optimized structure of $\text{Fe}_{12}@(11,0)$ with total spin $S=18$. The lower panels give the net spin density $\rho_\alpha(r) - \rho_\beta(r)$. The values are given on the equisurface $\rho_\alpha = 0.025$ a.u.; green $\rho_\alpha = \rho_\beta$, red $\rho_\alpha > \rho_\beta$ and blue $\rho_\alpha < \rho_\beta$.

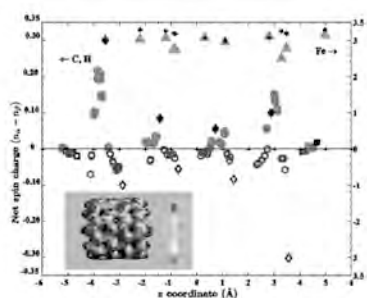


Figure 2. Mulliken net spin charges ($n_\alpha - n_\beta$) at each atom for $\text{Fe}_{12}@\text{(11,0)}$ as a function of the z coordinate. Dots: C; squares: H; triangles: Fe. Red full symbols: α character; empty blue symbols: β character. Black rhombus: C, black squares: H atoms of the pure ZNT(11,0) (full black α , empty black β). The black crosses indicate the values for Fe atoms in the free aggregate. Note the different vertical scales for Fe and for C and H. The inset gives the net spin density $\rho_\alpha(r) - \rho_\beta(r)$ in a different orientation from that of Figure 1.

The carbon part of the combined system results slightly flattened with an ellipsoidal distortion, in both cases. It presents also a net global contribution to the majority spin, mainly located at the zigzag rings on the two extremes of the nanotube, as is shown in Figure 2. The net spin density structure indicates that both external carbon rings have some atoms dominated by majority and some dominated by minority spin, so the antiferromagnetic detailed structure of the isolated ZNT described in [8] is lost.

Only a few states around the frontier orbitals have a noticeable hybridization between states of the Fe atoms and those of the carbon atoms.

Even if it is not found an enhancement on the magnetic properties with respect to those of the isolated iron cluster, the interaction of the iron aggregate with the carbon nanotube preserves the strong ferromagnetic coupling of the iron atoms, with a minor reduction of the total magnetic moment. Our results indicate that the carbon nanotube is slightly spin polarized and ferromagnetically

coupled to the Fe aggregate. However the contribution of the carbon structure to the net spin is not able to overcome the decreasing of the magnetic moment in the iron aggregate.

Localized edge states characteristic of zigzag boundaries in carbon nanostructures show up also in these iron-carbon composites.

This work has been supported by MICINN, Spain (MAT2008-06483-C03-01 and -03).

REFERENCES

1. Kohanoff J., *Electronic Structure Calculations for Solids and Molecules: Theory and Computational Methods*, Cambridge University Press, New York, (2006)
2. te Velde G. et al., *J. Comput. Chem.*, **22**, 931 (2001); Fonseca-Guerra C. et al., *Theor. Chem. Acc.*, **99**, 391 (1998)
3. Taylor A. et al., *J. Nanos. and Nanotech.*, **9**, 5709 (2009)
4. Wolf S. A. et al., *Science*, **294**, 1488 (2001)
5. Wolny F. et al., *Nanotechnology*, **21**, 435501 (2010); Winkler A. et al., *J. Appl. Phys.*, **99**, 104905 (2006)
6. Gautam U. K. et al., *Sci. Technol. Adv. Mater.*, **11**, 054501 (2010); Eliseev A. A. et al., *Russian Chemical Reviews*, **78**, 833 (2009)
7. Grobert N. et al., *Appl. Phys. Lett.*, **75**, 3363 (1999); Peng D. L. et al., *J. Magn. Magn. Mater.*, **92**, 143 (2005)
8. Mañanes A., Duque F., Ayuela A., López M. J., Alonso J. A., *Phys. Rev. B*, **78**, 35432 (2008)

Interferencia cuántica en anillos de grafeno

J. Munárriz, A. V. Malyshev y F. Domínguez-Adame

Departamento de Física de Materiales, Universidad Complutense de Madrid; j.munarriz@fis.ucm.es.

El grafeno es un material muy prometedor para reemplazar los semiconductores que se emplean habitualmente en la fabricación de dispositivos electrónicos. Esto es debido a su naturaleza bidimensional así como a la alta movilidad que presentan los portadores de carga. Sin embargo, existen ciertos problemas que deben solventarse para que el uso masivo de grafeno sea una realidad. Uno de estos problemas está relacionado con el denominado efecto túnel de Klein [1], propuesto originalmente en el contexto de la física de altas energías. Dado que los electrones en grafeno se comportan como fermiones relativistas sin masa, la aparición de este efecto túnel anómalo conduce a la perfecta transparencia de las barreras de potencial [2]. Por ello, lograr el confinamiento de los portadores sigue siendo un reto en la investigación en grafeno. Algunas propuestas para controlar la corriente en los dispositivos se basan en el efecto Aharonov-Bohm en anillos de grafeno [3,4], en los cuales un campo magnético produce un desfase de la función de onda en cada brazo y permite modular la corriente eléctrica.

En este trabajo proponemos un nuevo diseño de anillo cuántico basado en grafeno donde el control de la corriente se logra mediante un potencial de puerta, que al ser aplicado en dirección transversal al eje del dispositivo rompe la simetría del sistema y provoca comportamientos diferentes de los portadores de carga según el brazo observado. Este diseño no requiere de un campo magnético para conseguir la modulación de la corriente, por lo que su implementación práctica resulta más sencilla. La figura 1 muestra el esquema del diseño que proponemos. La corriente pasa de la fuente al drenador a través del anillo de grafeno, y mostraremos que puede ser controlada mediante el potencial de puerta V_G . Como es bien conocido, el transporte a través de canales de grafeno depende del tipo de borde que presente. Nuestra propuesta preserva el tipo de borde pues la red atómica de grafeno es invariante bajo rotaciones de 60° . De esta manera se minimizan los efectos de dispersión que se producirían en caso de aparecer diversos tipos de borde en la muestra. Por brevedad aquí nos restringimos a bordes de tipo *armchair*.

Hemos empleado un modelo de enlace fuerte para describir los estados de los electrones en los orbitales π del grafeno. La energía de sitio depende de la posición debido a la presencia del potencial de puerta. La integral de intercambio entre átomos de C vecinos próximos es -2.8 eV. Las soluciones de la ecuación de Schrödinger en los contactos son ondas planas y, empleando el método de transmisión cuántica en los bordes [5], podemos calcular la función de onda de los electrones en todo el dispositivo. Una

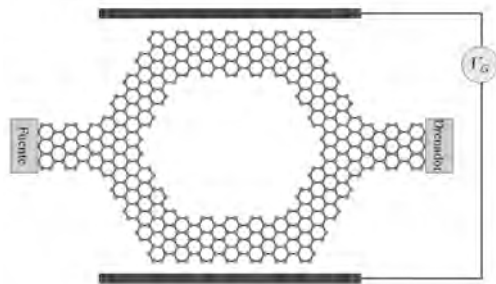


Figura 1. Anillo de grafeno para controlar la corriente entre la fuente y el drenador mediante el potencial de puerta V_G .

vez que se conoce el coeficiente de transmisión es posible determinar la característica corriente-voltaje mediante el formalismo de dispersión de Landauer-Büttiker.

La figura 2 muestra el coeficiente de transmisión en un anillo de grafeno cuando la anchura del canal es de 63 hexágonos de carbono, que presenta un gap de 38 meV. En dicha figura se observa que el coeficiente de transmisión presenta máximos bien definidos en función tanto de la energía de Fermi como del potencial de puerta. Cuando el borde es de tipo *zig-zag* el patrón de transmisión cambia, pero también existen máximos de bien definidos.

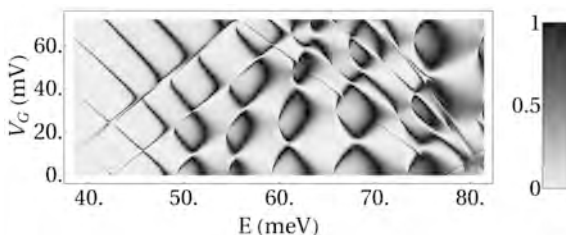


Figura 2. Coeficiente de *transmisión* en función de la energía de Fermi y del potencial de puerta V_G

La aparición de máximos en la transmisión sugiere que es posible interrumpir en su práctica totalidad el flujo de corriente a través del sistema aplicando un potencial de puerta. Para comprobar esta premisa hemos calculado la corriente en función de dicho potencial. En la figura 3 se muestra la corriente que circula en el dispositivo en función del potencial de puerta, cuando la energía de Fermi se sitúa en 50 meV. En la figura podemos comprobar que, en efecto, la corriente eléctrica se puede controlar de manera efectiva mediante el potencial de puerta. Aunque la respuesta es similar a la que presentan los transistores de efecto campo, el origen de la misma es diferente. En nuestro caso el control de la corriente se consigue mediante la interferencia cuántica de la función de onda a lo largo de los dos brazos del anillo de grafeno. Finalmente hay que mencionar que hemos comprobado que este efecto es robusto bajo la presencia de desorden moderado en los bordes del canal de grafeno.

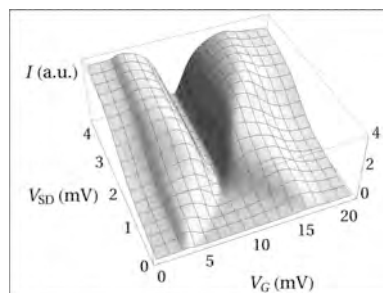


Figura 3. Corriente en función del potencial de puerta V_G

REFERENCIAS

- [1] Klein O., Z. Phys. **53**, 157 (1929).
- [2] Kastnelson M. I., Novoselov K. S. y Geim A. K., Nat. Phys. **2**, 620 (2006).
- [3] Russo S., Oostinga J. B., Wehenkel D., Heersche H. B., Sobhani S. S., Vandersypen L. M. K. y Morpurgo A. F., Phys. Rev. B **77**, 085413 (2008).
- [4] Wurm J., Wimmer M., Baranger H. U. y Richter K., Semicond. Sci. Technol. **25**, 034003 (2010).
- [5] Lent C. S. y Kirkner D. J., J. App. Phys. **67**, 6353 (1990).

Local spin-orbit interaction in quantum dots and carbon nanotubes

David Sánchez

Instituto de Física Interdisciplinar y Sistemas Complejos (CSIC-UIB)

The Rashba interaction is a salient spin-orbit interaction in semiconductors which occurs due to interfacial electric fields in asymmetric heterostructures. This removes the spin degeneracy of conduction electron states and the resulting splitting can be tuned with external gates. Recently, we have predicted strongly modulated transmission line-shapes (antiresonances) when the spin-orbit coupling is localized inside a quantum wire attached to normal leads [1]. These antiresonances originate from path interference between a direct channel through the Rashba region and a channel that interacts with a quasibound state formed by the Rashba potential in the region (the Rashba dot). We demonstrate that the Rashba intersubband coupling controls the coupling between the continuum and discrete states and that the lineshape is of the Fano form [2]. For energies above the onset of the second conductance plateau, strong polarization effects are observed [3]. When electron-electron interactions are taken into account, Coulomb blockade resonances have a Fano form, whereas in the strong coupling regime we predict an oscillating conductance as a function of the Rashba strength [4]. Furthermore, we find at very low temperature and in the presence of an Aharahov-Bohm flux that the Kondo resonance becomes split and that this splitting contains important corrections due to interactions [5]. Finally, we will discuss the effect of spin-orbit coupling in a carbon nanotube attached to ferromagnetic leads [6].

REFERENCES

- [1] D. Sanchez and Ll. Serra, Phys. Rev. B 74, 153313 (2006).
- [2] D. Sanchez, Ll. Serra, and M.-S. Choi, Phys. Rev. B 77, 035315 (2008).
- [3] M.M. Gelabert, Ll. Serra, D. Sanchez, and R. Lopez, Phys. Rev. B 81, 165317 (2010).
- [4] R. Lopez, D. Sanchez and Ll. Serra, Phys. Rev. B 76, 035307 (2007).
- [5] J.S. Lim, M. Crisan, D. Sanchez, R. Lopez, and I. Grosu, Phys. Rev. B 81, 235309 (2010).
- [6] J.S. Lim, R. Lopez, G.L. Giorgi, and D. Sanchez, Phys. Rev. B 83, 155325 (2011).

Magnetic and transport properties of cobalt nanostructures grown by focused electron beam induced deposition

J.M. De Teresa,^{1,2} A. Fernández-Pacheco,^{1,2} R. Córdoba,^{1,2} L. Serrano,^{1,2} S. Sangiao,^{1,2} I. Serrano,^{1,2} L. Morellón,^{1,2} M.R. Ibarra,^{1,2}

¹Departamento de Física de la Materia Condensada and Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón (ICMA), CSIC-Universidad de Zaragoza, 50009 Zaragoza (Spain);

²Laboratorio de Microscopías Avanzadas (LMA), Instituto de Nanociencia de Aragón (INA), Universidad de Zaragoza, 50018 Zaragoza (Spain);

Cobalt-based nanostructures have been grown by focused electron beam induced deposition (FEBID) using $\text{Co}_2(\text{CO})_8$ as precursor gas on Si substrates or insulating Si// SiO_2 substrates. Our previous work showed that Co by FEBID can be grown with high purity, showing remarkable properties for applications in magnetic sensing, storage and logic [1-4]. In the present contribution we show the successful growth of cobalt nanowires with lateral size down to 30 nm, which could be used for highly-integrated domain-wall manipulation. Besides, for the application in Hall sensing, we have grown Co squares with lateral size around 100 nm plus narrower contact lines to permit injection of current from opposite edges of the square and measurement of voltage from the remaining two contacts.

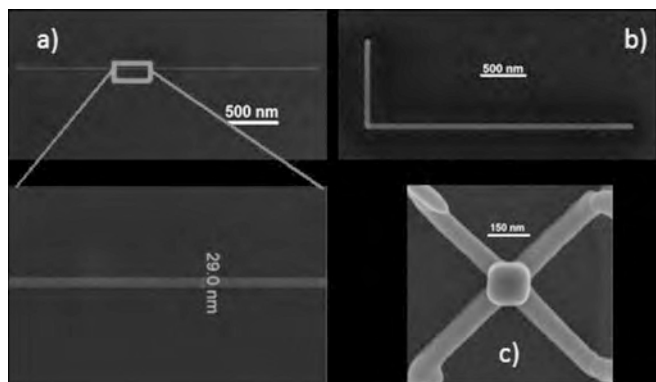


Figure 1. (a) SEM image of a cobalt nanowire with dimensions 3 μm in length, 29 nm in width and 30 nm in thickness. (b) SEM image of a cobalt nanostructure (L shape) with dimensions 3 μm in length for the horizontal part and 1 μm in length for the perpendicular part, 40 nm in width and 30 nm in thickness. (c) SEM image of one cobalt Hall sensor based on four independent 75 nm-wide cobalt lines and the central square 150 nm-wide.

REFERENCES:

1. A. Fernández-Pacheco et al, J. Phys. D : Appl. Phys. **42**, 055005 (2009).
2. A. Fernández-Pacheco et al, Appl. Phys. Lett. **94**, 192509 (2009).
3. A. Fernández-Pacheco et al, Nanotechnology **20**, 475704 (2009).
4. S. Sangiao et al., Solid State Communications **151**, 37 (2011).

Magnetic Properties of Magnetic Ionic Liquid 1-Ethyl-3-Methylimidazolium Tetrachloroferrate(III).

I. de Pedro^a, A. Garcia-Saiz, Jesús A. Blanco^b and J. Rodríguez Fernández^a

^a CITIMAC, Facultad de Ciencias, Universidad de Cantabria, 39005 Santander, Spain.

^b Departamento de Física, Universidad de Oviedo, 33007 Oviedo, Spain.

depedrov@unican.es.

Ionic liquid (IL) refers to a class of liquid that are composed solely of ions [1] that exists as a liquid-state at room temperature. The increasing interest in room temperature ionic liquids (RTILs) is related to their possible exploitation as environmentally friendly neoteric solvents because of their vanishing vapour pressure, thermal and chemical stability, air and moisture stability, wide liquidus range, solvent capability, etc... [1] Ionic liquids with anions containing transition metal complexes (i.e. magnetic ionic liquids or MILs) are the earliest developed RTILs [2]. Potential applications have been located in MILs during this decade in relation with their magnetic properties such as transport and separation of materials, magnetic fluids based on nanoparticles, acting as an absorbent liquid when applying a magnetic field or in a catalysis process [3,4]. Therefore, the MILs are considered to open up a wide range of applications because of their magnetic and electrochromic switching. Until recently almost all magnetic ionic liquids containing tetrachloroferrate ion FeCl_4^- evidenced a paramagnetic temperature dependence of the magnetic susceptibility, with only small deviations from the Curie law at low temperatures. However, the 1-ethyl-3-methylimidazolium tetrachloroferrate, Emim[FeCl₄], clearly exhibits a long-range antiferromagnetic ordering below the Néel temperature $T_N \approx 3.8$ K in polycrystalline state ($T_{\text{frozen}} = 285$ K) [Figure 1]. In addition, the shape of the magnetic ordering is depending on the cooling speed indicating that the magnetic coupling could be modified [5] [Figure 2]. In this work, we present a complete magnetic study of Emim[FeCl₄] together with the physical characterization. This material opens a very interesting window in the study of magnetostructural correlations of this type of compounds.

- [1] Ionic Liquids IIIB: Fundamentals, Progress, Challenges and Opportunities (Eds.: R.Rogers, K. R.Seddon), ACS Symposium Series 902, American Chemical Society, Washington, DC, 2005.
- [2] S. Hayashi, et al., Chem. Lett. 33 (2004) 1590.
- [3] M. Okuno, et al., Appl. Phys. Letter. 89 (2006) 132506.
- [4] F.C. Oliveira, et al., J. Phys. Chem. 113 (2009) 8566.
- [5] I. de Pedro, et al., J. Phys: Condens. Matter, 22 (2010) 296006.

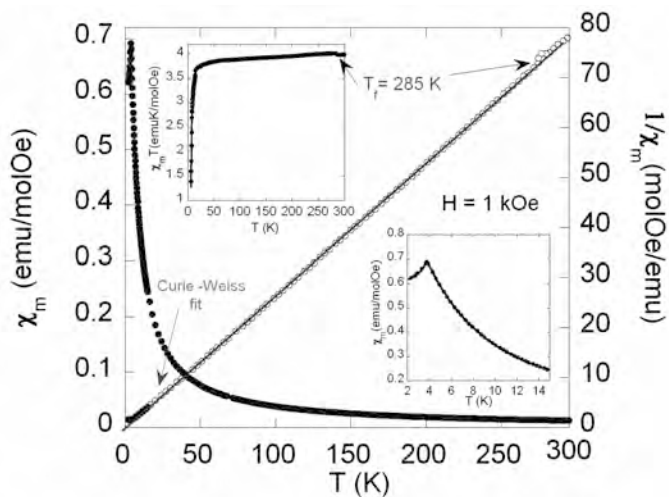


Figure 1. Temperature dependence of χ_m and $1/\chi_m$ for $\text{Emim}[\text{FeCl}_4]$ measured under 1kOe. The upper inset shows the temperature dependence of $\chi_m T$ and the lower inset an enlargement of low temperature region of χ_m .

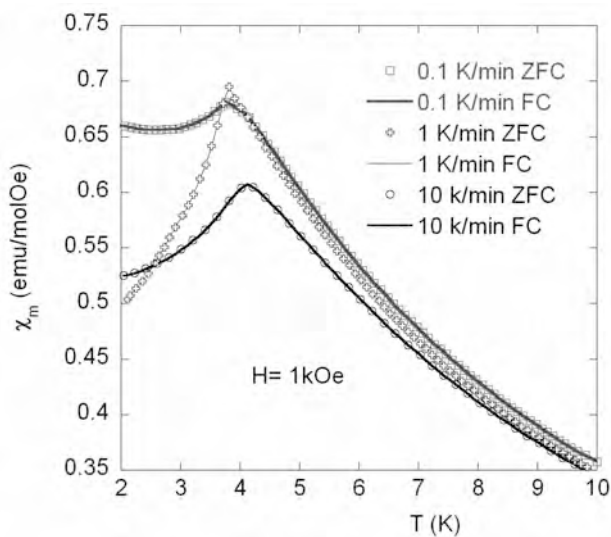


Figure 2. Low temperature ZFC-FC magnetic susceptibility measured at 1kOe at different cooling speeds from 300K down to 2K.

Magnetic properties of TbAl₂ nanometric alloys

D. P. Rojas¹, L. Fernández Barquín², C. Echevarria-Bonet², J. Rodríguez Fernández²

¹ Departamento de Física. Universidad Carlos III de Madrid, 2891, Leganés, Spain

² DCITIMAC. Facultad de Ciencias, Universidad de Cantabria, 39005, Santander, Spain

The magnetic properties of nanometric TbAl₂ alloys have been investigated. The Curie temperature (T_c) of these nanometric alloys is strongly size dependent and decreases from 103 K for the bulk alloy down to 98 K for the 14 nm alloy, as the particle volume is reduced. This reduction of T_c has been explained by a finite-size scaling law of type $[T_c(D) - T_c(\infty)]/T_c(\infty) = -(D/D_0)^{-1/\nu}$, with $\nu = 0.7$ and $D_0 = 2.2 a$ (a , the lattice parameter), in agreement with the three-dimensional Heisenberg model (see Fig. 1). The size dependence of the coercivity has also been established. An increase of the coercivity from 0.08 kOe (bulk) to 1 kOe for 10 h milled alloy, indicates the crossover from multidomain to single domain behavior around 85 nm, as expected from the estimate of the critical size of monodomain particles. The field dependence of the magnetization indicates a faster thermal reduction of the magnetization of the nanosized alloys (17 % in 300 h milled alloy with mean particle size of 14 nm) related to the bulk (3%), in the temperature range between 5 K and 30 K. The results can be explained as a direct consequence of the competing effects of the surface and the purely finite-size effects, in an ensemble of nanometric particles suffering interactions.

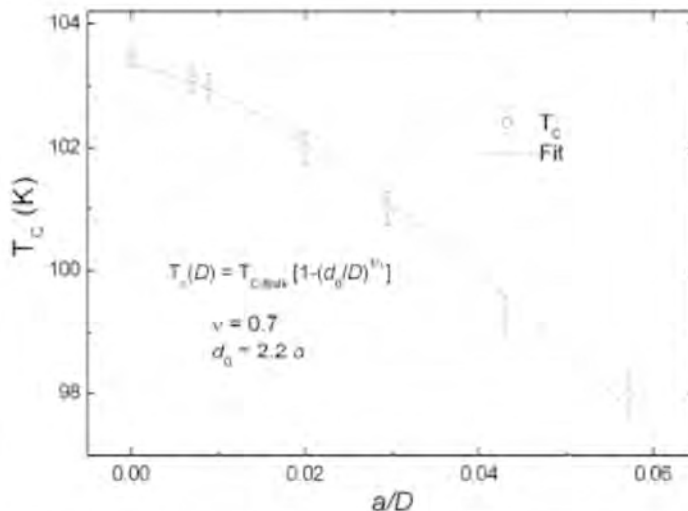


Fig. 1. Size dependence of the ferromagnetic-paramagnetic (T_c) transition temperature. The solid line is a fit according to Eq. (1) corresponding to a finite-size scaling model.

Nanoporous Alumina Membranes for Nanomaterials Synthesis

García¹ J., Vega¹ V., Rosa¹ W.O., González¹ L., Prida¹ V. M., Hernando¹ B.

¹ Depto. Física, Universidad de Oviedo, Calvo Sotelo s/n 33007-Oviedo, Spain

The synthesis of nanostructured materials with functional properties based on template-assisted techniques has drawn a huge scientific interest in the last 15 years, after the discovering of the so-called two-step anodization process of aluminium by Masuda and Fukuda [1]. Highly ordered self-assembled nanoporous alumina membranes (NAM) have been used since then as templates for the synthesis of a wide variety of nanomaterials, among them there are, for instance, nanowire and nanotube arrays of different composition, nanoparticle chains and thin films with ordered nanostructures patterned on their surface, such as antidots [2] or nanohill [3] arrays.

Different kind of materials at nanoscale can be performed by combining this two-step anodization processes with chemical and/or physical routes like electroplating or sputtering. Electrochemical processes are one of handful routes to control many parameters in an easy, quickly and low cost way, important issues for industrial implementation. Hence, by using this technique we are able to produce materials with having only one metallic element to binary or more alloys with different ratios and replicating the hexagonal pores ordering of the NAM. Such feature allows us to synthesize nanomaterials with wide range properties for different applications, as in magnetic data storage, actuators based in the Shape Memory Effect (SME) and magnetic refrigerators based in the Magnetocaloric effect (MCE), regardless of other properties appearing at nanoscale.

In this work, we provide an overview about the fabrication of magnetic materials using the combination of NAM and electroplating. Our main aim is focused on magnetic behaviour of different metallic materials, taking into account the effect of the temperature, applied magnetic field, electrical current, shape, geometry, anisotropy, etc.

REFERENCIAS

1. Masuda H., Fukuda K., *Science*, **268**, 1466 (1995).
2. Béron F., Pirota K.R., Vega V., Prida V.M., Fernández A., Hernando B., Knobel M., *New Journal of Physics*, **13**, 013035 (2011).
3. Rosa W. O., Jaafar M., Asenjo A., Vázquez M., *Nanotechnology*, **7**, 075301 (2009).

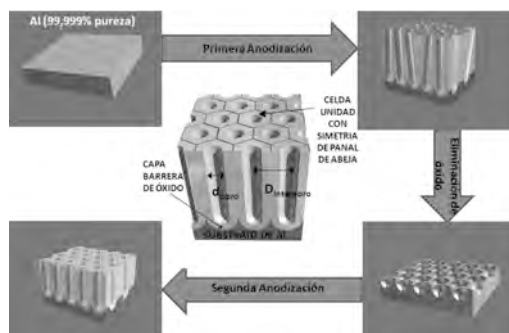


Figure 1. Two-step anodization process of aluminium during the synthesis of a nanoporous alumina template.

Nuevas aleaciones magnéticas basadas en NiMnSn

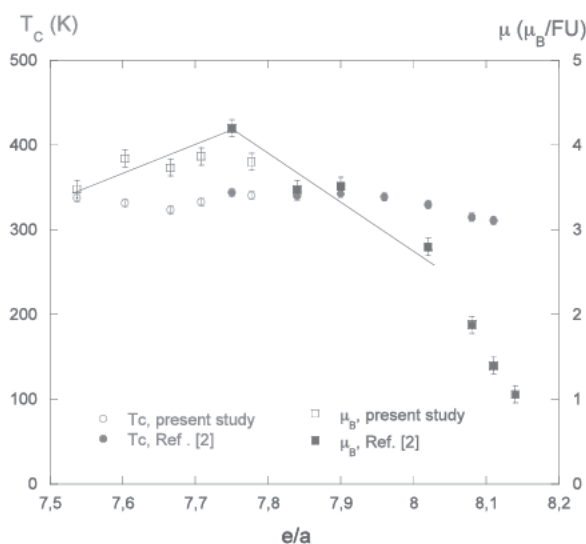
B. Valle García¹, J. M. Barandiarán², P. Lázpita², J. Gutiérrez² and V.A. Chernenko^{2,3}

¹ E.U.I.T.I. Bilbao, UPV/EHU, Spain

² Facultad de Ciencia y Tecnología, UPV/EHU, Spain

³ IKERBASQUE, Basque Foundation for Science, 48011 Bilbao, Spain

Entre los materiales activos o inteligentes han despertado recientemente gran interés las aleaciones Ferromagnéticas con Memoria de Forma (FSMA), por su capacidad de presentar grandes deformaciones (hasta el 10%) en respuesta al campo magnético [1]. La preparación de estos materiales requiere un control cuidadoso de la composición y tratamientos térmicos para conseguir la estructura y propiedades adecuadas. Muchas de sus propiedades dependen directamente de la concentración electrónica (e/a). En este trabajo presentamos la serie de aleaciones $\text{Ni}_{40+x}\text{Mn}_{39-x}\text{Sn}_{21}$ ($x=0, 2, 4, 6$ y 8), que presentan una concentración electrónica entre 7,5 y 7,8. Estas nuevas aleaciones basadas en NiMnSn completan los estudios de otros autores [2]. Todas ellas presentan ferromagnetismo. Se ha determinado su estructura y propiedades magnéticas mediante rayos-X, microscopía, medidas de imanación, calorimetría, etc. En la figura se representa la variación de la T_c y del momento magnético total por fórmula unidad, μ , frente a la concentración electrónica, comparados con los valores de [2] para el resto de la serie.



[1] "Ferromagnetic Shape Memory Alloys II", VA Chernenko and JM Barandiarán, Eds. Trans Tech Pub., Switzerland 2010

[2] Kanomata et al., Materials Science Forum, Vol. 583 (2008) 119

Obtaining metallic nanowires using amyloid-like fibril as biotemplating and their catalytic application

Josué Juárez¹, Adriana Cambón¹, Antonio Topete¹, Manuel Alatorre-Meda¹, Miguel A. Valdez², Pablo Taboada¹, and Víctor Mosquera¹

¹Universidad de Santiago de Compostela, Spain.

²Universidad de Sonora, México.

* josueelias.juarez@usc.es

Metal NPs have received considerable attention in the past decade because of their particular optical, electronic, magnetic and catalytic properties and their important application in many fields such as nanosensors, catalysis, biomedicine and biological labelling [1]-[2]. On the other hand, the assembled arrays of NPs into well-structured bioscaffolds can provide new optical and electronic properties that are distinct compared to individual particles or disorganized macroscale agglomerates [3]-[4]. Amyloid fibrils are capable to organize metal NPs into predefined 1-D nanostructures. The resulting hybrid materials might have potential uses in electronic, optical and chemical devices. In particular, gold and iron oxides nanowires were obtained using protein lysozyme fibrils as biotemplates, and their potential uses as catalytical and MRI contrast agent were proved. To generate a complete metal coating layer on the amyloid fibril surface, in the case of gold wires, firstly we attached either gold seeds on the biotemplate surface followed by the sequential addition of a gold salt growth solution. To obtain iron oxide wires, we *in situ* synthesise Fe₃O₄ NPs by precipitation in an alkaline medium [5]. The gold hybrid metallic fibrils have proved to be useful as catalytic substrates, due to their great catalytical activity when incorporated in the reduction reaction of *p*-nitrophenol to *p*-aminophenol by NaBH₄ [6]. The Fe₃O₄-coated fibrils were tested to be effective as potential MRI contrast agent as result of their high relaxativities if compared to previously developed materials.

- [1] Sepulveda, B.; Angelomé, P. C.; Lechuga, L. M.; Liz Marzán, L. M., *Nano Today* **2009**, *4*, 244-251. *Soft Matter* **2011**, *7*, 225-236.
- [2] Hurts, S. J.; Han, M. S.; Lytton-Jean, A. K. R.; Mirkin, C. A., *Anal. Chem.* **2007**, *79*, 7201-7205.
- [3] Sotiropoulou, S.; Sierra-Sastre, Y.; Mark, S. S.; Batt, C. A., *Chem. Mater.* **2008**, *20*, 821-834.
- [4] Behrens, S. S.; *J. Mater. Chem.* **2008**, *18*, 3788-3798.
- [5] Jain, T. K.; Morales, M. A.; Sahoo, S. K.; Leslie-Pelecky, D. L.; Labhasetwar, V., *Molecular pharmaceuticals* **2005**, *2*, 194-205.
- [6] Juárez, J.; Cambón, A.; Goy-López, S.; Topete, A.; Taboada, P.; Mosquera, V., *J. Phys. Chem. Letters* **2010**, *1*, 2680-2687.

Acknowledgements: Authors thank financial support from Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN) through Research Project MAT 2007-6107, Xunta de Galicia through Project INCITE09206020PR, and Fundación Ramón Areces through Project 2010/CL509. S.G.-L. thanks MICINN for her FPI scholarship.

Ondas acústicas en nanohilos de GaN

D. Martínez-Gutiérrez¹, V. R. Velasco²

¹Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, CSIC; diegom@icmm.csic.es.

²Instituto de Ciencias de la Construcción Eduardo Torroja, CSIC; vvr@ietcc.csic.es.

Recientemente se han obtenido nanohilos de III-nitruros [1-3]. Los nanohilos obtenidos experimentalmente presentan facetas de sección hexagonal con espesores grandes y estructura wurtzita. El GaN presenta muchas posibilidades para aplicaciones en nanotecnología debido a su gap directo, su alta movilidad de portadores y la realización experimental de diversas nanoestructuras como los nanohilos.

La aproximación del continuo, basada en la teoría de la elasticidad, constituye un primer paso en el estudio de las propiedades vibracionales de nanohilos con un coste relativamente bajo en computación. Permiten obtener una imagen cualitativa de las curvas de dispersión y dan una primera estimación, de calidad muy razonable, para las ramas acústicas más bajas cuando no se dispone de información experimental. En el caso de los nanotubos de carbono se ha empleado la aproximación de medio isótropo. Esto no es posible para estos nanohilos ya que poseen estructura wurtzita y al tener espesores grandes entra en juego la anisotropía elástica del material de cara a su descripción mediante la teoría de la elasticidad. En este caso no es posible obtener una solución en forma cerrada para los nanohilos.

Para estudiar las ondas acústicas de los nanohilos de GaN con sección hexagonal y la anisotropía elástica asociada a la estructura wurtzita emplearemos un método teórico desarrollado originalmente en los estudios de espectroscopia ultrasónica resonante para obtener las propiedades vibracionales de objetos no homogéneos [4]. El método, conocido como “algoritmo-xyz” se basa en el desarrollo de los desplazamientos elásticos en términos de una base formada por productos de potencias de las coordenadas cartesianas.

Se han estudiado así las ondas acústicas de nanohilos de GaN, tanto macizos como huecos, que poseen sección hexagonal. Como comparación se estudiaron sistemas con sección circular, es decir nanotubos. Se comprobó que los modos de orden más bajo son bastante similares, tanto en la forma de las curvas de dispersión como en los valores de las frecuencias. Los modos de orden más alto presentan mayores diferencias. En todos estos casos se ha estudiado la influencia del espesor de los nanohilos sobre las curvas de dispersión.

Obtenemos 3 modos que parten de frecuencia cero en lugar de los 4 que aparecen en otros nanohilos de simetría más baja. En nuestro caso, como en los nanotubos y los nanohilos de sección cuadrada, el modo más bajo es doblemente degenerado. A bajas frecuencias varía cuadráticamente con el vector de onda (k), correspondiendo a un modo de flexión, mientras que para valores mayores de k tiene una dependencia lineal. Los otros dos modos varían linealmente con k a baja frecuencia y corresponden a un modo de torsión y al modo longitudinal acústico (Figura 1).

El estudio de los desplazamientos cuadráticos medios permite ver la distribución espacial de los diferentes modos en los nanohilos. Aparecen diversos modos cuyas componentes de los desplazamientos elásticos se concentran en los bordes del nanohilo

decaendo hacia el interior del nanohilo. Estos comportamientos son análogos a los obtenidos en cálculos de dinámica de redes para nanohilos de Si [5-6].

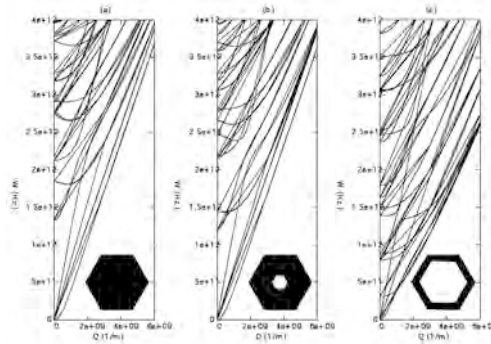


Figura 1. Relación de dispersión de ondas elásticas propagándose en nanohilo de wurtzita con sección hexagonal: (a) nanohilo macizo de lado 1 nm; (b) nanohilo hueco con lado interior de 0.25 nm y exterior de 1 nm; (c) nanohilo hueco con lado interior de 0.75 nm y exterior de 1 nm.

1. Hu J., Bando Y., Golberg D., Liu Q., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **42**, 3493-3497 (2003)
2. Liu B., Bando Y., Tang C., Shen G., Golberg D., Xu F., *Appl. Phys. Lett.*, **88**, 093120/1-3 (2006)
3. Schäfer-Nolte E.O., Stoica T., Gotschke T., Limbach F., Sutter E., Sutter P., Calarco R., *Appl. Phys. Lett.*, **96**, 091907/1-3 (2010)
4. Migliori A., Sarrao J. (1997). *Resonant Ultrasound Spectroscopy*. Wiley-Interscience
5. Thonhauser T., Mahan G.D., *Phys. Rev. B* **69**, 075213/1-5 (2004)
6. Peelaers H., Partoens B., Peeters F. M., *Nano Lett.* **9**, 107-111 (2009)

Pressure dependence of Raman modes in double wall carbon nanotubes filled with HgTe in the rocksalt phase

E. Belandria¹, E. Flahaut², F. Rodríguez³, R. Valiente⁴ and J. Gonzalez^{3,5}

¹Centro de Estudios Avanzados en Optica, Universidad de los Andes, 5201 Mérida, Venezuela, ²CIRIMAT, Université de Toulouse, F-31400 Toulouse, France, ³DCITIMAC-Malta Consolider Team, Universidad de Cantabria, 39005 Santander, Spain, ⁴Dto de Física Aplicada- Malta Consolider Team, Universidad de Cantabria, 39005 Santander, Spain, ⁵Centro de Estudios de Semiconductores, Universidad de los Andes, Mérida 5201, Venezuela

The preparation of highly anisotropic one-dimensional (1D) structures confined into carbon nanotubes (CNTs) is a key objective in nanoscience. In this work, capillary effect was used to fill double wall carbon nanotubes (DWCNTs) with crystalline HgTe in the ordered rocksalt phase [1-2]. The samples are characterized by high resolution transmission electronic microscopy (Fig. 1) and Raman spectroscopy. In order to investigate their structural stability and unravel the differences induced by intershell interactions, unpolarized room temperature Raman spectra of radial and tangential modes of DWCNTs filled with 1D nanocrystalline HgTe excited with 514 nm were studied at high pressures. Up to 13 GPa we found a pressure coefficient of $4.7 \text{ cm}^{-1}\text{GPa}^{-1}$ for the internal tube and $7.2 \text{ cm}^{-1}\text{GPa}^{-1}$ for the external one [3]. In addition, the tangential band of the external and internal tubes broadens and decreases in amplitude. All findings lead to the conclusion that the outer tube acts as a protection shield for the inner. No pressure-induced structural phase transition was observed in the studied pressure range.

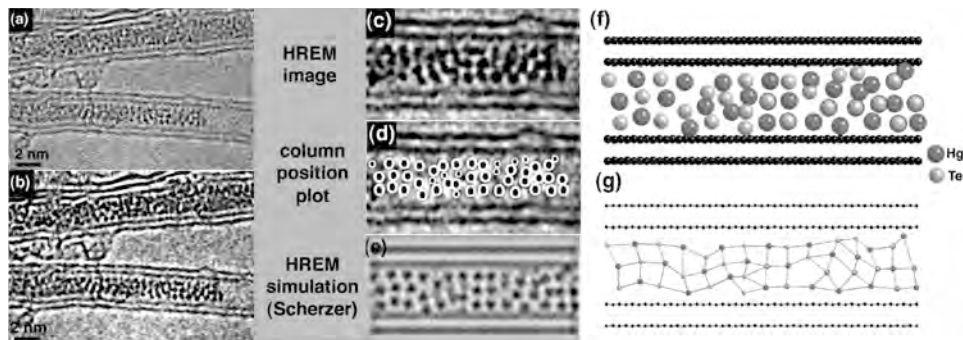


Figure 1: HRTEM images of HgTe@DWCNT. Some regions apparently show ordered rocksalt-like filling

REFERENCES:

- [1] E. Belandria, M. Millot, J. M. Broto, E. Flahaut, F. Rodriguez, R. Valiente and J. Gonzalez, Carbon, **48** (2010) 2566–2572
- [2] C.M. Tilmaciu, B. Soula, A.M. Galibert, P. Lukanov, L. Datas, J. Gonzalez, L. Fernandez Barquin, J. Rodriguez Fernandez F. Gonzalez-Jimenez, J. Jorge and E. Flahaut, Chem. Commun., (2009) 6664–6666
- [3] E. del Corro, J. González, M. Taravillo, E. Flahaut and V. Garcia Baonza, Nanoletters, **8**, No.8, (2008) 2215

Propiedades magnéticas, térmicas y eléctricas de $\text{Y}_3\text{Fe}_{5-x}\text{Al}_x\text{O}_{12}$ obtenido a partir de precursores nanocrystalinos

D. Salazar¹, M. R. Díaz-Guillén², O. J. Durá¹,
J. P. Andrés¹ y M. A. López de la Torre¹

¹Departamento de Física Aplicada, Universidad de Castilla-La Mancha, 13071-Ciudad Real, España; daniel.salazar@uclm.es

²CINVESTAV Unidad Saltillo, 25000-Saltillo, Coahuila, México.

Los granates de hierro puro $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ (YIG) y con diferente dopaje han sido objeto de estudio durante las últimas 5 décadas, debido a sus interesantes propiedades físicas [1, 2] como: bajas pérdidas dieléctricas en la región de microondas, pequeña anchura de línea en resonancia magnética, así como buenos valores de magnetización de saturación. Estas características hacen del YIG un excelente material para múltiples aplicaciones, por ejemplo dispositivos de microondas y de almacenamiento magnético. La principal dificultad a la hora de fabricar dispositivos basados en YIG es su alta temperatura de sinterizado ($T_s > 1350^\circ\text{C}$), que hace poco viable su producción. Algunos autores [3, 4] han demostrado que T_s disminuye ($< 1100^\circ\text{C}$) al dopar el YIG con diversos materiales. Por otra parte, el YIG muestra efecto magnetoelectrico (EM), lo que indica la interesante relación entre las propiedades eléctricas y magnéticas en este material [5]. Además, en YIG se observa EM de primer y segundo orden, dando lugar este último a efectos magnetocapacitivos que dependen de la dirección de la magnetización.

Las muestras estudiadas ($\text{Y}_3\text{Fe}_{5-x}\text{Al}_x\text{O}_{12}$, $x = 0, 2.5, 5$) se obtuvieron mediante prealeado mecánico de los polvos de partida (Fe_2O_3 , Al_2O_3 e Y_2O_3) en un molino planetario, y posterior sinterizado en aire. Los experimentos de difracción de rayos-X (DRX) evidencian una estructura amorfa después de 48 horas de molienda, sobre la que se superponen picos anchos y poco definidos, que indican la presencia de una fase nanocrystalina. Utilizando un sistema de análisis térmico se realizó un estudio simultáneo de termogravimetría (TG) y calorimetría diferencial de barrido (DSC) para simular el proceso de sinterización de las muestras (ver Fig. 1). Se detectaron procesos de reacción y cristalización a varias temperaturas en las curvas de TG y DSC. Para la muestra $x = 0$, ($\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$: YIG) se observa un pico en la derivada de TG (DTG) a 1011°C , que interpretamos como la mínima temperatura de sinterizado óptimo del material. Los perfiles de difracción de RX para YIG sinterizado a 900° y 1100°C indican que por debajo de $T_s = 1000^\circ\text{C}$ el material aún presenta una fase minoritaria, que desaparece para T_s mayores. En la muestra $x = 0$, ($\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$: YAG) aparece un pico a $T \approx 880^\circ\text{C}$ en ambas curvas (DSC y DTG). En este caso los patrones de DRX aún indican la presencia de una fase minoritaria para la muestra tratada a 1100°C , que desaparece para $T_s = 1300^\circ\text{C}$, por encima del pico a $T = 1133^\circ\text{C}$ en la curva DSC. Para la muestra

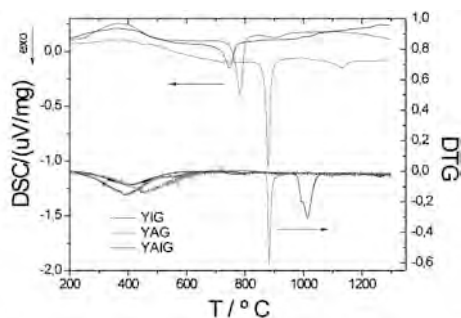


Figura 1. Curvas de DTG y DSC de los polvos YIG, YAG y YAG pre-aleados.

$x = 2.5$ ($\text{Y}_3\text{Fe}_{2.5}\text{Al}_{2.5}\text{O}_{12}$; YAIG) se observan 2 procesos a 782° y a 902° C, no observándose fases minoritarias para $T_s \geq 1100^\circ$ C.

Los precursores nanocrystalinos obtenidos tras 48 h de molienda se compactaron en frío con una presión uniaxial de 700 MPa, sinterizándose posteriormente a 1300° C en aire. Estas muestras, con tamaño de grano microcristalino, se han empleado como referencia a la hora de comparar con otras de tamaño de grano nanométrico, así como para estudios de calor específico, propiedades magnéticas y eléctricas. Para reducir el tamaño de grano de las muestras se utilizó la técnica de molienda mecánica, obteniendo granos de ~ 20 nm después de 48 horas de molienda.

Mostramos en la figura 2 los resultados de medidas de calor específico en YIG y YAIG realizadas mediante DSC. Las curvas C_p vs. T muestran picos debidos a la transición ferrimagnética que tiene lugar en ambos materiales a una temperatura T_N . La altura y agudeza de los picos indican la homogeneidad de los materiales obtenidos mediante pre-aleación mecánica y tratamiento térmico. Los valores de T_N obtenidos tanto para YIG (534 K) como para YAIG (214 K) concuerdan con los determinados a partir de nuestras medidas de magnetización en función de la temperatura realizadas en un magnetómetro SQUID y con los obtenidos por otros autores.

Las propiedades eléctricas de YIG y YAIG se determinaron a partir de experimentos de impedancia compleja. Como ejemplo, mostramos curvas de permitividad ϵ' vs. ν en YIG (Fig. 3), en las que se revelan dos procesos de relajación debidos a: i) procesos de salto de portadores entre Fe^{2+} y Fe^{3+} , ii) inhomogeneidades estructurales, como fronteras de grano. Otros autores han observado en YIG estos procesos y un tercero a más baja frecuencia [6].

Compararemos estos resultados con los obtenidos en muestras de tamaño de grano nanométrico con el fin de determinar cómo influyen los efectos de tamaño y las fronteras de grano en las propiedades eléctricas, térmicas y magnéticas de estos materiales.

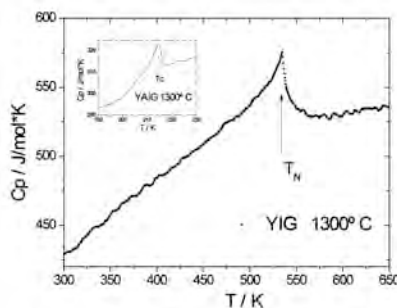


Figura 2. Curvas C_p vs. T para YIG y YAIG (recuadro) sinterizados a 1300° C.

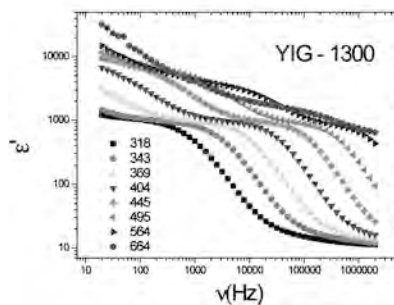


Figura 3. Dependencia de ϵ' en función de la frecuencia a diferentes temperaturas para YIG sinterizado a 1300° C.

REFERENCIAS

1. Bertaut, F., Forrat, F., *Compt. Rend.*, **242**, 382 (1956)
2. Geller, S., Gilleo, M. A., *J. Phys. Chem. Solids*, **3**, 30 – 36 (1957)
3. Geller, S., et. al., *Appl. Phys. Lett.*, **3**, 21 (1963)
4. Song, Y. Y., et. al., *J. Magn. Magn. Mater.*, **177**, 257 – 258 (1998)
5. Kohara, Y., et. al., *Phys. Rev. B*, **82**, 104419 (2010)
6. Wu, Y. J., et. al., *Appl. Phys. Lett.*, **91**, 092912 (2007)

Propiedades magnetoelásticas de heteroestructuras de $[\text{TbFe}_2/\text{Fe}_3\text{Ga}]_n$

R. Ranchal, V. González-Martín, E. López

¹Departamento Física de Materiales, Facultad de Física, Universidad Complutense de Madrid.
rociran@fis.ucm.es.

Introducción

El TbFe_2 , en su fase cristalina de Laves, es el material que tiene mayor constante de magnetostricción a temperatura ambiente, $\lambda \sim 2500$ ppm [1]. Sin embargo su alta coercitividad, $H_C \sim 4$ kOe, hace que el TbFe_2 no resulte idóneo para su uso en el desarrollo de dispositivos magnetostrictivos. Recientemente se están estudiando aleaciones de Fe dopado con Ga que, cuando el contenido de Ga es del 19 o 28 %, presentan una constante de magnetostricción de 400 ppm [2]. Aunque esta magnetostricción es un orden de magnitud menor que la del TbFe_2 , las aleaciones de Fe-Ga tienen la ventaja de que su campo coercitivo es mucho menor, $H_C < 60$ Oe. En este trabajo hemos estudiado heteroestructuras de $[\text{TbFe}_2/\text{Fe}_3\text{Ga}]_n$ a fin de conseguir un nuevo sistema de alta magnetostricción y bajo campo coercitivo con posibilidad de ser aplicado en futuros sensores magnetostrictivos.

Las muestras se crecieron por la técnica de sputtering de magnetrón sobre sustratos de vidrio a temperatura ambiente. Las heteroestructuras (espesor 400 nm) están formadas por bicapas de TbFe_2 y Fe_3Ga de espesores iguales, que varían entre 200 nm ($n = 1$) y 12.5 nm ($n = 16$) y siendo n el número de bicapas. Para evitar la oxidación y mejorar las características estructurales de las capas de TbFe_2 se utilizaron capas de Mo de 20 nm de espesor como *buffer* y *capping* [3].

Las muestras se caracterizaron estructuralmente mediante la técnica de difracción de rayos-X y magnéticamente mediante los ciclos de histéresis obtenidos en un magnetómetro de muestra vibrante (VSM) a temperatura ambiente. La caracterización magnetoelástica se llevó a cabo en un sistema basado en una lengüeta cuya flexión al aplicar un campo magnético se mide por métodos ópticos.

Resultados experimentales y discusión

Las heteroestructuras de $[\text{TbFe}_2/\text{Fe}_3\text{Ga}]_n$ presentan un campo coercitivo mucho menor que el del TbFe_2 . En la Figura 1 se observa que los procesos de imanación están influenciados por el espesor de las capas, de modo que la disminución del espesor favorece los procesos de rotación frente a los de desplazamiento de paredes. Esto se puede explicar teniendo en cuenta el aumento de tensiones que aparece en la intercara entre el TbFe_2 y el Fe_3Ga debido al gran desacople de red entre ambos. A partir de las medidas de difracción de rayos-x hemos obtenido el parámetro de red de cada capa confirmando el aumento de dichas tensiones al reducir el espesor de las mismas.

La caracterización magnetoelástica de las heteroestructuras de $[\text{TbFe}_2/\text{Fe}_3\text{Ga}]_n$ muestra que, al disminuir el espesor de las capas, aumenta el acople magnetoelástico $\lambda \cdot Y$, siendo Y el módulo de Young. Nuestros resultados indican que existe una correlación entre las propiedades magnetoelásticas y las tensiones en las intercara. En las heteroestructuras de capas con menor espesor, 12.5 nm, y por tanto en las que las tensiones son mayores, se ha obtenido un valor de $\lambda_{\perp} \times Y$ próximo a 6 MPa (Figura 2).

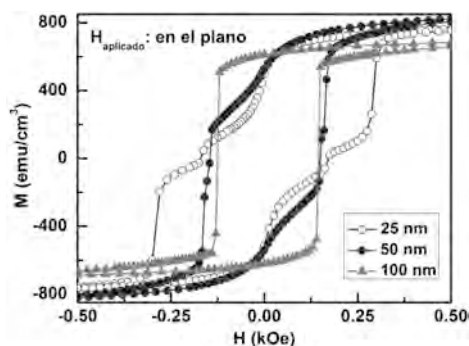


Figura 1. Ciclos de histéresis medidos con el campo aplicado en el plano para heteroestructuras con capas de diferente espesor.

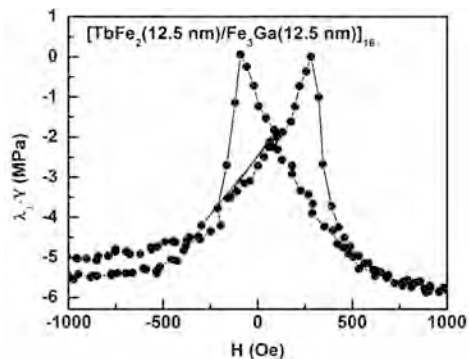


Figura 2. Magnetostricción de la heteroestructura $[\text{TbFe}_2(12.5 \text{ nm})/\text{Fe}_3\text{Ga}(12.5 \text{ nm})]_{10}$ obtenida con el campo perpendicular al eje de la lengüeta.

Estas muestras presentan un campo coercitivo menor que 250 Oe por lo que sus características son prometedoras para el desarrollo de nuevos sensores magnetostrictivos.

Agradecimientos. Este trabajo está financiado a través del Programa de Grupos de Investigación Santander-UCM convocatoria GR3510-A y el proyecto de la Comunidad de Madrid y la Universidad Complutense de Madrid CCG10-UCM/MAT-4621.

REFERENCIAS

1. Clark A. E., Belson H. S. *Phys. Rev. B*, **5**, 3642 (1972)
2. Clark A. E., Restorff J. B., Wun-Fogle M., Lograsso T. A., Schalgel D. L. *IEEE Trans. Magn.*, **36**, 3238 (2000)
3. Ranchal R., López E., Prieto J. L., Aroca C., *Acta Materialia*, **59**, 2865-2871 (2011)

Propiedades ópticas y de emisión de campo de nanoestructuras de óxido de galio.

I. López¹, E. Nogales, P. Hidalgo, B. Méndez, J. Piqueras

Departamento de Física de Materiales, Facultad de Física, Universidad Complutense de Madrid, 28040, Madrid, España.

¹ inaki.lopez@fis.ucm.es

En estas últimas décadas, algunos trabajos se han centrado en el estudio de materiales pertenecientes a la familia de los TCO (*Transparent Conducting Oxides*), entre los que se encuentra el óxido de galio (β -Ga₂O₃) y otros tales como el óxido de estaño (SnO₂) o el óxido de zinc (ZnO). La importancia de estos óxidos reside en que presentan un intervalo de energía prohibido mayor que el rango de energías del espectro visible. El β -Ga₂O₃, con un *gap* de 4.9 eV, presenta excelentes propiedades ópticas y electrónicas: una conductividad eléctrica aceptable debido a sus defectos nativos; una alta transparencia en la región del visible del espectro electromagnético, y un elevado índice de refracción. Dichas propiedades lo hacen muy interesante para diversas aplicaciones en dispositivos electrónicos y fotónicos. Por otra parte, los avances en nanociencia y nanotecnología demandan un estudio de las propiedades físicas de los materiales en la nanoescala. Los nanohilos semiconductores son una de las morfologías más estudiadas en los últimos años, desde la síntesis hasta las aplicaciones. En este trabajo se presentan las propiedades de emisión de luz en el rango azul-ultravioleta y las propiedades de emisión de campo de nanohilos y microestructuras basadas en Ga₂O₃. Los resultados demuestran que el Ga₂O₃ es un buen candidato en futuros dispositivos optoelectrónicos en el ámbito de la nanotecnología.

Las nanoestructuras de óxido de galio se han obtenido a partir de la oxidación de galio metálico bajo un flujo de gas argón a temperaturas de entre 1100 °C y 1300 °C. Concretamente se utilizaron pastillas de polvos de óxido de galio compactado como substratos. El mecanismo de crecimiento predominante es un proceso vapor-sólido (VS), sin la necesidad de un catalizador durante el proceso de crecimiento. La **Figura 1** muestra una imagen representativa de las morfologías obtenidas: nanohilos individuales y estructuras planas. La morfología obtenida depende no solo de los parámetros del tratamiento térmico, sino también de la incorporación de impurezas dopantes.

La Microscopía Electrónica de Transmisión muestra que los nanohilos obtenidos tienen una alta calidad cristalina. Con el fin de mejorar su comportamiento, tanto óptico como eléctrico y debido a que el óxido de galio acepta una gran variedad de dopantes [1 - 4], se han estudiado sus propiedades al ser dopado con estaño o indio.

Las medidas de emisión de campo de los nanohilos de óxido de galio se han realizado dentro de la cámara de vacío de un microscopio electrónico de barrido. Se han obtenido valores de campo de encendido y umbral en nanohilos de óxido de galio

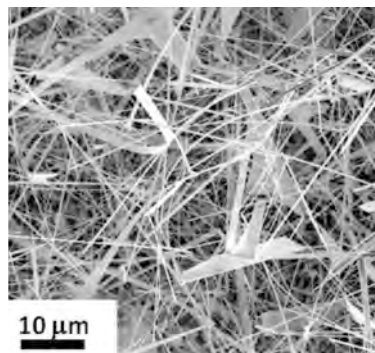


Figura 1. Imagen de electrones secundarios en un SEM de las nanoestructuras de Ga₂O₃.

dopado con estaño por debajo de $1\text{ V}/\mu\text{m}$, para distancias entre electrodos de $400\ \mu\text{m}$. El valor de la función de trabajo del óxido de galio dopado con estaño se ha obtenido a partir de medidas de fotoemisión de electrones realizadas en el Sincrotrón Elettra de Trieste (línea *ESCA microscopy*). Los resultados muestran una mejora en las propiedades de emisión de campo de los nanohilos de Ga_2O_3 dopados con Sn, con un campo de umbral más bajo (por debajo de $1,0\ \text{V}/\text{m}$) (Figura 2) respecto a nanohilos sin dopar. Los valores obtenidos son competitivos con los obtenidos en otros materiales nanoestructurados, como los nanotubos de carbono.

Asimismo, se han estudiado las propiedades estructurales y de luminiscencia de nanoestructuras dopadas con indio. La incorporación de In no es uniforme en las microestructuras y produce una modificación en la estructura de defectos nativos, lo que puede influir en sus propiedades ópticas o eléctricas. Las técnicas de caracterización utilizadas han sido espectroscopía Raman, microanálisis de rayos X y catodoluminiscencia (CL) en el SEM. En los espectros de CL locales se refleja este cambio a través de la emisión de vacantes en la región UV-azul. El análisis local de espectroscopia Raman con alta resolución espacial en el microscopio confocal reveló también modificaciones en los modos de vibración asociados a variaciones de concentración de In.

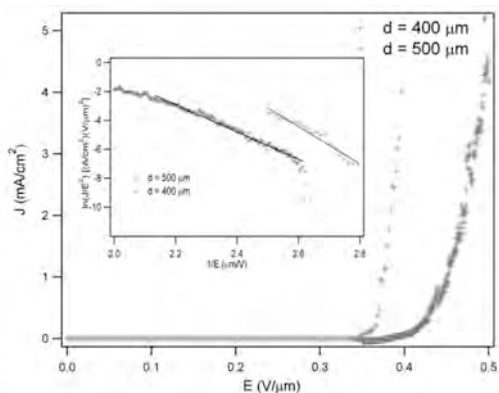


Figura 2. Densidad de corriente de emisión de campo frente a campo eléctrico obtenida de nanohilos de Ga_2O_3 dopados con estaño para dos distancias entre electrodos.

Agradecimientos

Este trabajo está financiado por el MICINN (proyecto MAT 2009-07882 y CONSOLIDER Ingenio CSD 2009-00013).

REFERENCIAS

1. E. Nogales, J. A. García, B. Méndez and J. Piqueras, *J. Appl. Phys.* **101** 033517 (2007).
2. E. Nogales, B. Méndez and J. Piqueras, *Nanotechnol.* **19** 035713 (2008).
3. E. Nogales, J. A. García, B. Méndez and J. Piqueras, *Appl. Phys. Lett.* **91** 133108 (2007).
4. J. Díaz, I. López, E. Nogales, B. Mendez and J. Piqueras, *J. Nanopart. Res.*, DOI 10.1007/s11051-011-0370-7 (2011).

Quantum depinning of the magnetic vortex core in micron-size permalloy disks.

Ricardo Zarzuela¹, Saül Vélez¹, Joan Manel Hernandez¹, Javier Tejada^{1*}, Valentyn Novosad²

¹Grup de Magnetisme, Departament de Física Fonamental, Facultat de Física, Universitat de Barcelona.

* jtejada@ubxlab.com

²Materials Sciences Division, Argonne National Laboratory.

La topología del equilibrio en materiales magnéticos blandos puede ser no uniforme: experimentalmente se ha observado que, en ausencia de campo magnético aplicado, discos micrométricos de estos materiales exhiben el *estado vórtice* como el estado de equilibrio magnético del sistema [1,2]. El estado vórtice se caracteriza por una magnetización espiral y por un *núcleo* cuyo momento magnético es transversal al plano del disco. El tamaño de este núcleo magnético es comparable a la longitud de intercambio del material (aprox. 10 nm) y cabe destacar el papel único que éste juega en las propiedades dinámicas del sistema: aunque el núcleo no tiene un efecto significativo en las propiedades estáticas del sistema (ocupa menos del 0.01% del volumen del disco), si que gobierna completamente la dinámica de bajas frecuencias del campo de spines. Más concretamente, el espectro de excitación de estos discos micrométricos se caracteriza por el *modo girotrópico*, que se corresponde con el movimiento precesional de tipo espiral del núcleo como un todo [3,4]. La frecuencia de este modo pertenece al rango de los sub-GHz y, por lo tanto, difiere intrínsecamente de los modos de excitación asociados a magnones (rango GHz). Por último, la quiralidad (dirección de giro) de este movimiento espiral viene determinada por la polarización del núcleo [4].

Al ser el núcleo magnético un objeto mesoscópico, éste es un perfecto candidato para observar efectos cuánticos macroscópicos. Debido a la intensa interacción de intercambio, el momento magnético del núcleo vorticial se comporta como un todo y su valor es del orden de los miles de magnetones de Bohr, de manera que es plausible observar su tuneo cuántico entre estados de equilibrio clásicamente estables. El estudio de relajaciones temporales de este momento magnético es un método experimental sencillo para observar esta fenomenología cuántica: a temperaturas finitas, estas relajaciones ocurren por activación térmica, mientras que en el límite de T tendiendo a 0, las relajaciones continúan independientemente de la temperatura debido al *underbarrier quantum tunneling*. Este comportamiento se ha observado ampliamente en muchos sistemas magnéticos, de entre los que cabe destacar los Single Domain Particles [5], clústers magnéticos [6], líneas de flujo en superconductores tipo-II [7] y, muy recientemente, interfaces Normal-Superconductor en superconductores tipo-I [8].

La aplicación de un campo magnético *in-plane* sobre estos discos micrométricos provoca el desplazamiento del núcleo magnético perpendicularmente a la dirección del campo [2]. Experimentalmente se ha observado que la dinámica de los núcleos vorticiales puede verse afectada por la presencia de defectos estructurales en los discos [9]. En esta charla mostraremos experimentalmente la irreversibilidad magnética y la dinámica cuántica de los núcleos magnéticos en matrices de discos micrométricos hechos de Permalloy ($\text{Fe}_{81}\text{Ni}_{19}$), a bajas temperaturas, inducidas mediante la aplicación de un campo magnético *in-plane* [10]. Estos resultados han sido interpretados dentro del marco del *depinning* cuántico de estos núcleos magnéticos [11], la cuál nos permite dar estimaciones de los parámetros intrínsecos del potencial de pinning a partir de las medidas de la viscosidad magnética de estos discos [10].

REFERENCIAS

- [1] Cowburn R.P. , Koltsov D.K. , Adeyeye A.O. , Welland M.E. y Tricker D.M., *Phys. Rev. Lett.* , **83**, 1042 (1999).
- [2] Shinjo T., Okuno T., Hassdorf R., Shigeto K y Ono T., *Science*, **289**, 930 (2000).
- [3] Gusliencko K. Yu *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **91**, 8037 (2002).
- [4] Choe S.-B. *et al.*, *Science*, **304**, 420 (2004).
- [5] Tejada J. y Zhang X. X., *J. Magn. Magn. Mater.*, 140-144, 1815 (1995).
- [6] Friedman J. R., Sarachik M.P. , Tejada J. y Ziolo R., *Phys. Rev. Lett.*, **76**, 3830 (1996).
- [7] Tejada J., Chudnovsky E. M. y García A., *Phys. Rev. B*, **47**, 11552 (1993).
- [8] Chudnovsky E. M., Vélez S., García-Santiago A., Hernandez J. M. y Tejada J., *Phys. Rev. B*, **83**, 064507 (2011).
- [9] Compton R.L., Chen T. Y. y Crowell P. A., *Phys. Rev. B*, **81**, 144412 (2010).
- [10] Zarzuela R., Vélez S., Hernandez J. M., Tejada J. y Novosad. V., Submitted (2011).
- [11] Zarzuela R. y Tejada J., Submitted (2011).

Resonant response of magnetostrictive/new high-T piezoelectric polymer magnetoelectric laminate

J Gutiérrez¹, A Lasheras¹, J M Barandiarán¹, J L Vilas², M San Sebastián² and L León²

¹ Departamento Electricidad y Electrónica, Facultad de Ciencia y Tecnología, Universidad del País Vasco UPV/EHU, 48080-Bilbao, Spain

² Departamento Química Física, Facultad de Ciencia y Tecnología, Universidad del País Vasco UPV/EHU, 48080-Bilbao, Spain

Magnetostrictive/piezoelectric hybrid composites have attracted recently new interest as high sensitivity sensors and actuators [1]. One of the most common used geometry consists in laminate Terfenol or amorphous magnetostrictive / piezoelectric layers, and maximum magnetoelectric effect has been found at the electromechanical resonance of the system [2]. Most of these composites use PZT as piezoelectric component.

We present results concerning the fabrication of such laminate composites sensor by using Vitrovac 4040® ($\text{Fe}_{39}\text{Ni}_{39}\text{Mo}_4\text{Si}_6\text{B}_{12}$) as the magnetostrictive amorphous component and two different piezoelectric polymers: poly(vinylidene fluoride) (PVDF) and 2,6(β -CN)APB/ODPA (poli 2,6) polyimide, a new high temperature piezoelectric polymer. PVDF is a well-known piezoelectric polymer [8]. Its glass transition and melting temperatures are 238 K and 444 K, respectively, but its Curie temperature is at 373 K and therefore we must expect its piezo- and pyro- electric response will decay above this temperature. The new amorphous piezoelectric polymer to be also tested is the poli2-6 polyimide. Detailed information about synthesis, thermal characterization and electric polarization processes can be found in [9]. Briefly, its main parameters are a glass transition temperature of $T_g \approx 473.2$ K (≈ 200 °C), a degradation temperature of $T_d \approx 783.2$ K, and a remnant polarization of 3.1 mC/m² after applying a voltage of 1300 V to the film.

We have measured (at the magnetoelastic resonance frequency) room temperature induced magnetoelectric voltages of 79.6V/cm.Oe (see Fig.1) and a sensitivity of 357 mV/Oe of the laminate when using PVDF, and 0.35 V/cm.Oe and a sensitivity of 37 mV/Oe when the poli 2,6 polyimide is used as piezoelectric component.

We have also tested the magnetoelectric response of both laminated composites at temperatures up to 85 °C, and we have observed that the PVDF polymer piezoelectric response quickly decays (see

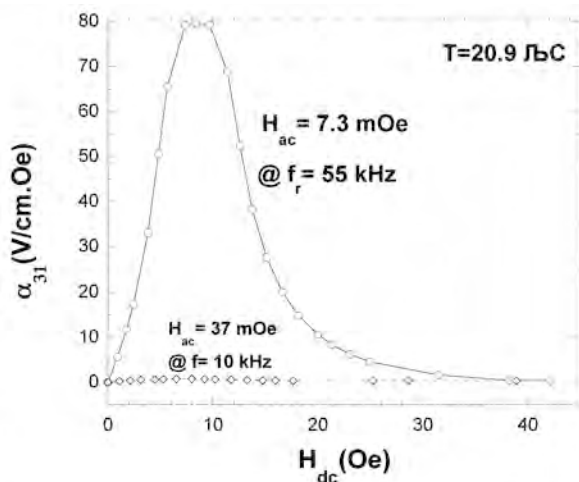


Figure 1.- Room temperature measured α_{ME} magnetoelectric coefficient with the applied dc magnetic field at resonant (55 kHz) and sub-resonant (10 kHz) frequencies, for the composite V4040/PVDF.

Fig.2 left). However, still some 5 V/cm.Oe can be obtained from this laminated composite at 85 °C.

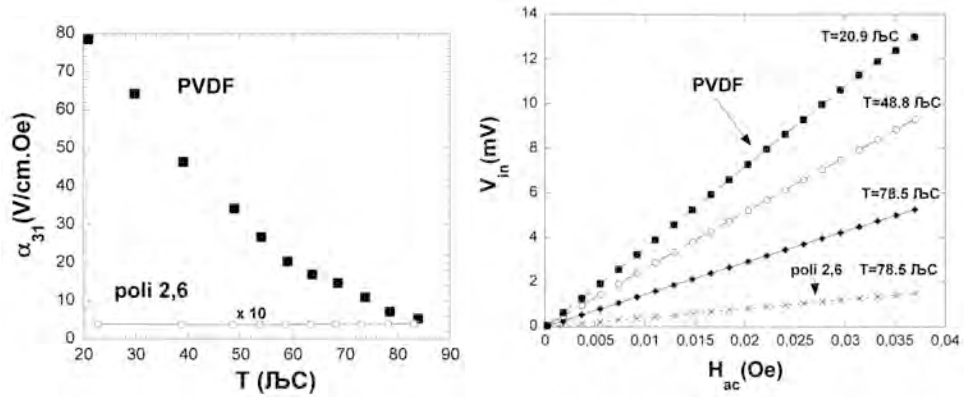


Figure 2.- (left) Temperature dependence of the measured α_{ME} magnetolectric coefficient at the resonance for the composites V4040/PVDF (applied $H_{dc}=8.3$ Oe) and V4040/poli2-6 (applied $H_{dc}=11$ Oe); (right) temperature dependence of the sensitivity to the applied ac field, for the composite V4040/PVDF. The sensitivity for the V4040/poli2-6 at high temperature is also shown for comparison.

In the case of the V4040/poli2-6 composite, the good properties with temperature observed in the characterization of the polymer reflect in the temperature behaviour of the magnetolectric device: α_{31} keeps practically constant its value as the temperature increases, and we still measure the room temperature measured 0.3 V/cm.Oe at 85 °C.

Fig. 2 (right) shows how, in quite an analogous way, the sensitivity of the V4040/PVDF composite also decreases with temperature changing from 357 mV/Oe (< 0.3 nT) at room temperature to 142 mV/Oe (< 0.8 nT) at 78 °C. As expected, this sensitivity has only a little change with temperature for the V4040/poli2-6 composite, being of 37 mV/Oe (< 2.7 nT) at 78 °C.

This mild behaviour with temperature makes this type of composite attractive for high temperature applications such as sensors in working machinery at the industry or low distance near field communications in aggressive environments (i.e., the desert, a tunnel or fighting a fire).

Síntesis y caracterización de TiO_2 dopado con metales de transición

C. Vázquez¹, M.A. Peche-Herrero², D. Maestre¹, A. Cremades¹, J. Ramírez-Castellanos², J. González-Calbet² y J. Piqueras¹

¹Departamento de Física de Materiales, Facultad de CC. Físicas, Universidad Complutense de Madrid, 28040, Madrid. fazket@gmail.com

²Departamento de Química Inorgánica I, Facultad de CC. Químicas, Universidad Complutense de Madrid, 28040, Madrid.

La síntesis controlada de materiales nanométricos funcionales posibilita el desarrollo de sus aplicaciones en múltiples dispositivos de elevado interés tecnológico. En concreto, las excepcionales propiedades físicas que presentan las nanopartículas de TiO_2 permiten ampliar y optimizar las aplicaciones de este material en campos tan diversos como los procesos de fotocatalisis, la detección de gases o los dispositivos fotovoltaicos. Mediante el dopado controlado de estas nanopartículas con elementos metálicos, tales como V, Cr, Mn o Fe, se consigue modificar las propiedades ópticas, eléctricas y estructurales de estos materiales, ampliando así su funcionalidad. Por lo tanto el estudio de los efectos provocados por la incorporación de los diferentes dopantes en la matriz de TiO_2 , así como la evolución de sus propiedades ópticas en función de diferentes tratamientos térmicos, requieren de un estudio detallado.

Las nanopartículas analizadas en el presente trabajo de investigación han sido sintetizadas a 650 °C mediante un proceso químico a partir de precursores poliméricos [1].

Las propiedades luminiscentes de las nanopartículas de TiO_2 dopadas con diferentes metales han sido caracterizadas mediante la utilización de la técnica de catodoluminiscencia (CL) implementada en un microscopio electrónico de barrido. La catodoluminiscencia es una técnica que no sólo permite monitorizar los cambios en intensidad de luz asociados a la incorporación de los dopantes, sino que también permite estudiar la distribución espacial de los centros luminiscentes. Los resultados obtenidos muestran variaciones en la señal de CL en función del elemento empleado como dopante, así como de su concentración (Figura 1). Las principales variaciones en la señal de luminiscencia se centran en la emisión asociada al borde de banda (3.2 eV), así como la emisión centrada en 1.52 eV atribuida a la presencia de intersticiales de Ti^{3+} . Se observa además la aparición de una emisión compleja centrada en torno a 2.2 eV, asociada a la presencia de defectos profundos en el intervalo de energías prohibidas del material generados por la incorporación de los dopantes a la red del TiO_2 .

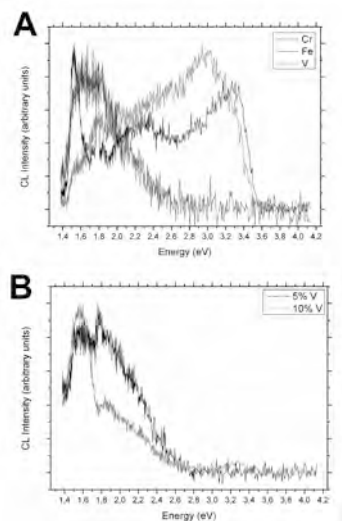


Figura 1. Espectros de CL adquiridos sobre nanopartículas de TiO_2 dopadas, mostrando variaciones de la señal de CL en función del elemento dopante (A) y de su concentración (B)

Utilizando las nanopartículas de TiO_2 dopadas como material precursor se han llevado a cabo tratamientos térmicos que permiten el crecimiento de nanoestructuras alargadas de óxido de titanio mediante un proceso vapor-sólido (VS) [2]. El método, desarrollado en nuestro grupo de investigación, consiste básicamente en la obtención de una pastilla a partir de polvos de óxidos compactados y su posterior tratamiento térmico en atmósfera dinámica de Ar, consiguiendo la formación de nano- y microestructuras alargadas de óxido de titanio, fundamentalmente varillas, sobre la pastilla en ausencia de catalizadores. Durante el tratamiento térmico podemos controlar, sobre un amplio rango, parámetros como el flujo de transporte del gas, la temperatura y la duración del tratamiento. Este control también permite modificar la morfología de las estructuras optimizando la relación superficie-volumen mediante la formación de nanoterrazas en la superficie del material [3], que es de suma importancia desde el punto de vista de la sensibilidad de los distintos dispositivos que pueden realizarse con el óxido de titanio como material activo.

Los tratamientos térmicos VS a los que se han sometido las muestras también nos permiten investigar los mecanismos involucrados en la incorporación de dopantes en la red del TiO_2 y de la misma forma podemos estudiar las variaciones de la luminiscencia en función de la temperatura a la que se realiza. Entre otros resultados, se observa la activación de procesos de difusión que generan una distribución heterogénea de los dopantes que tienden a acumularse en las fronteras de grano, como reflejan los resultados obtenidos mediante dispersión de rayos X en energías (EDS) (Figura 2).

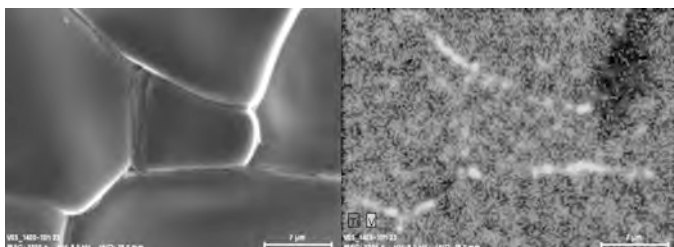


Figura 2. Imagen de electrones secundarios (izquierda) y su correspondiente imagen de EDS (derecha) donde se observa una mayor concentración de vanadio en las fronteras de grano.

REFERENCIAS:

1. Pechini M. P., Patent CA759514 (1967).
2. Maestre D., Cremades A., Piqueras J., *J. Appl. Phys.*, **97**, 044316 (2005)
3. Maestre D., Cremades A., Piqueras J., *Nanotechnology*, **17**, 1584–1588 (2006).

Searching for Magnetic Monopoles in Magnetic Materials using RXS: Haematite (α -Fe₂O₃) and BiFeO₃

A. Rodriguez-Fernandez¹, S. W. Lovesey², J.A. Blanco¹

¹Departamento de Física, Universidad de Oviedo;

²Condense Matter Theory Department, Rutherford Appleton Laboratory;
rodriguezfangel.uo@uniovi.es.

During the last decade many magnetic materials have been studied by different groups using a technique that uses both structural and electronic properties of materials. This technique is the resonant magnetic x-ray scattering, combination of the technique of Bragg scattering, along with a local technique, the resonant x-ray absorption, which is able to excite each chemical element in a molecule or solid in a unique and unambiguous. In our work is shown the study of different materials with this technique, one example is the study of collinear and canted magnetic motifs in hematite (α -Fe₂O₃) [1,2,3] investigated using x-ray Bragg diffraction magnified at the iron K-edge. We have applied a formulation that incorporates all magnetic contributions to resonant x-ray diffraction allowed by the established chemical and magnetic structures. Essential to a correct formulation of diffraction by a magnetic crystal with resonant ions at sites that are not centres of inversion symmetry are parity-odd atomic multipoles, time-even (polar) and time-odd (magneto-electric), that arise from enhancement by the electric-dipole (E1) - electric-quadrupole (E2) event. Analyses of azimuthal-angle scans on two space-group forbidden reflections, hexagonal (0,0,3)_h and (0,0,9)_h, collected by Kokubun et al. (2008) above and below the Morin temperature (TM \approx 250K), allow us to obtain good estimates of contributing polar and magneto-electric multipoles, including the iron anapole. We have also started to study the multiferroic bismuth ferrite (BiFeO₃).

[1] Lovesey, S. W., Rodriguez-Fernandez, A., Blanco J. A., *Phys. Rev. B*, **83** 054427 (2011)

[2] Finkelstein, K. D., Shen, Q., Shastri, S., *Phys. Rev. Lett.*, **69**,1612 (1992)

[3] Kokubun, J., Watanabe, A., Uehara, M., Ninomiya, Y., Sawai, H., Momozawa, N., Ishida, K., and Dmitrienko, V. E., *Phys. Rev. B*, **78**, 115112 (2008)

Síntesis de nanohilos de óxido de hierro

A. Llavona, A. Prados, B. Abad¹, H. Montes, M. Muñoz, L. Pérez y M.C. Sánchez

Departamento de Física de Materiales. Universidad Complutense de Madrid; santruji@fis.ucm.es

Uno de los grandes campos de investigación dentro de la Ciencia de Materiales lo constituye la síntesis de nanomateriales que puedan ser utilizados en Tecnología Biomédica. En este sentido, el material más utilizado con diferencia es el óxido de hierro sintetizado en forma de nanopartícula, generalmente esférica [1]. La utilización de nanohilos de óxido de hierro permite explorar las posibilidades que un cambio de morfología ofrece en este tipo de aplicaciones: mayor facilidad de guiado, posibilidad de rotar bajo la aplicación de un campo magnético externo... La posibilidad de fabricar nanohilos con distintos diámetros permite también el estudio de efectos de tamaño en las propiedades magnéticas [2].

En este trabajo exploramos dos posibles vías para la obtención de nanohilos de óxido de hierro, ambas basadas en la síntesis de nanohilos por electrodeposición, utilizando membranas porosas como plantilla.

La primera vía está basada en la síntesis de óxidos mediante un tratamiento térmico controlado de nanohilos metálicos previamente electrodepositados [3]. En este trabajo hemos partido de nanohilos monocristalinos de Fe electrodepositados en membranas de policarbonato y oxidados en aire a distintas temperaturas. A partir de éstos, hemos sintetizado nanohilos de óxido de hierro monocristalinos (ver figura 1). La estructura de los nanohilos, medida con difracción de rayos X y EXAFS, es de tipo hematita (Fe_2O_3), con independencia de la temperatura utilizada en el proceso de oxidación.

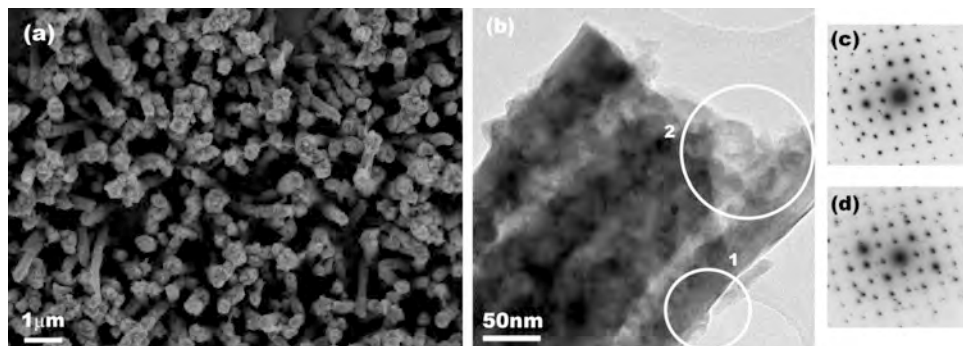


Figura 1. Nanohilos de óxido de hierro obtenidos por oxidación de nanohilos monocristalinos de Fe. Imágenes de microscopía electrónica de barrido (a) y de transmisión (b). Las figuras c y d muestran patrones de difracción de electrones tomados en las áreas 1 y 3 de la figura b respectivamente.

En la figura 1.a puede verse que los nanohilos tienen una morfología rugosa, fruto del proceso de oxidación al que han sido sometidos. Los patrones de difracción de electrones, que son compatibles con la estructura de hematita, muestran la alta calidad cristalina de los óxidos obtenidos.

¹ Actualmente en el Instituto de Microelectrónica de Madrid. CNM-CSIC

Desde el punto de vista de las aplicaciones magnéticas, la magnetita es el óxido de hierro más interesante. En los últimos años han aparecido en la literatura distintos trabajos de electrodeposición directa de magnetita en forma de película delgada [4]. Con el objeto de sintetizar magnetita, hemos seguido un proceso similar al descrito por Sorenson y colaboradores [4], pero realizando la electrodeposición a través de máscaras nanoporosas. En la figura 2 pueden observarse los nanohilos obtenidos. En este caso, la morfología es menos rugosa, ya que se han obtenido por síntesis directa. La calidad cristalina es también muy alta pero la estructura de los mismos no se corresponde a la magnetita sino a la goethita (α -FeO(OH)).

En este trabajo presentamos los resultados principales relacionados con los dos procesos de síntesis descritos.

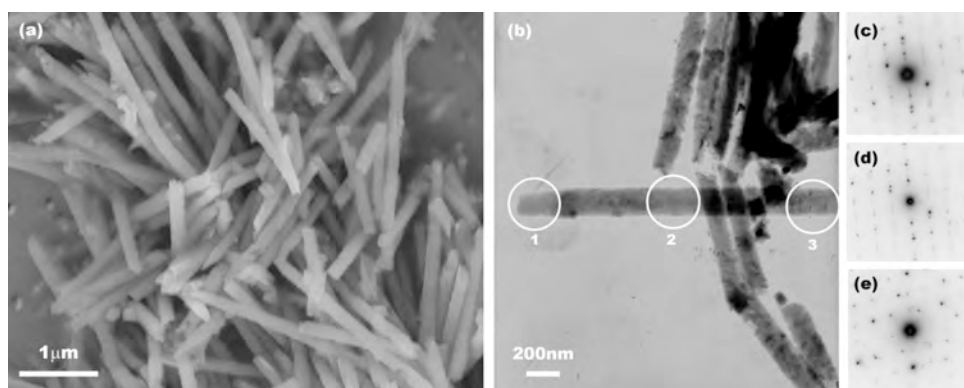


Figura 2. Nanohilos de óxido de hierro electrodepositados utilizando como plantilla una membrana porosa. Imágenes de microscopía electrónica de barrido (a) y de transmisión (b). Las figuras c-e muestran patrones de difracción de electrones tomados en las áreas 1-3 de la figura b respectivamente.

REFERENCIAS

1. G. Roca et al, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **42**, 224002 (2009)
2. C. Díaz-Guerra et al. *J Appl. Phys.* **106**, 104302 (2009)
3. A. Llavona et al., *Mater. Chem. Phys.* **124** (2010) 1177–1181
4. T. A Sorenson, *J. Am. Chem. Soc.*, **124** 7604 (2002).

Síntesis y caracterización de nanoestructuras y microestructuras alargadas de óxido de bismuto

M.Vila, C.Díaz-Guerra, J.Piqueras

Departamento de Física de Materiales, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid; Ciudad Universitaria s/n, 28040 Madrid, España. mvila@material.fis.ucm.es

El óxido de bismuto (Bi_2O_3) es un material interesante para aplicaciones en sensores de gases, dispositivos piezo-ópticos y células solares debido a su alto índice de refracción, alta permitividad dieléctrica y elevada conductividad iónica [1]. Este óxido puede encontrarse en cuatro fases cristalinas: la fase α monoclínica, la fase β tetragonal metaestable, la fase fcc y la fase δ bcc [2]. Son escasos los estudios relacionados con la síntesis de nanoestructuras de este óxido, mientras que algunas de sus propiedades físicas, como las luminiscentes, apenas se han investigado.

En este trabajo se han caracterizado nano y microestructuras alargadas de Bi_2O_3 obtenidas mediante un proceso de crecimiento vapor-sólido en un horno tubular horizontal bajo flujo de argón. Además, se presentan los primeros resultados de nanoestructuras alargadas jerarquizadas de Bi_2O_3 dopadas con Er. Para obtener ambos tipos de estructuras se ha usado como precursor Bi metálico prensado en forma de pastillas. En el caso de las nanoestructuras dopadas se añadió Er_2O_3 en polvo al precursor. Los tratamientos se llevaron a cabo a temperaturas comprendidas entre 500 y 800 °C, y durante tiempos de 1 y 8 h.

Asimismo, se ha realizado un estudio en pastillas de Bi_2O_3 tratadas en distintas atmósferas (aire y N_2) para obtener información adicional sobre los centros responsables de la luminiscencia del óxido.

La caracterización estructural de las muestras se ha llevado a cabo mediante microscopía electrónica de barrido (SEM), difracción de rayos X (XRD) y espectroscopia Raman. El estudio de la composición de las muestras se ha realizado mediante microanálisis de rayos X (EDX) en el SEM. Las propiedades ópticas se han estudiado mediante dos técnicas con elevada resolución espacial: catodoluminiscencia (CL) en el SEM y micro-fotoluminiscencia (micro-PL) en un microscopio óptico confocal.

Los tratamientos realizados a partir de Bi metálico a 800 °C han dado lugar a estructuras alargadas con una anchura aproximada de 20 μm y una longitud de 1 mm. Estas estructuras están formadas por un apilamiento de placas triangulares, terminando en la mayoría de los casos en pirámides truncadas. Las medidas de Raman y de XRD muestran que la fase α es mayoritaria, observándose también las fases δ y γ , como indica la aparición de picos Raman en 640 cm^{-1} [3] y 324 cm^{-1} [4] respectivamente. Los resultados de luminiscencia obtenidos tanto en los hilos como en pastillas tratadas en distintas atmósferas sugieren que algunas de las bandas de emisión están asociadas a la presencia de defectos que involucran vacantes de oxígeno.

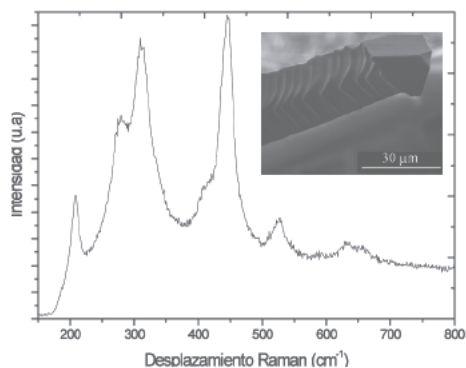


Fig 1. Espectro Raman de la punta del microhilo

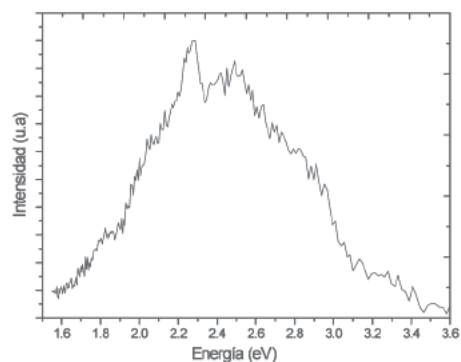
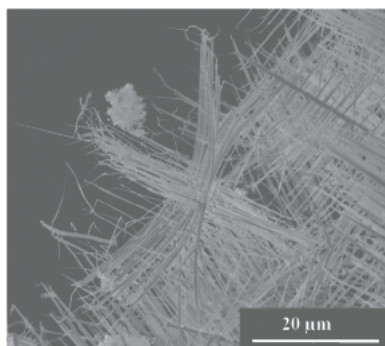
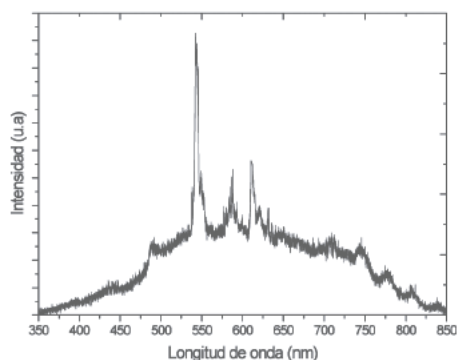


Fig 2. Espectro de CL del microhilo

Las nanoestructuras de Bi_2O_3 dopadas con Er crecen de manera jerárquica a lo largo de un eje principal de unos 600 nm de anchura, alrededor del cual crecen nanohilos de unos 100 nm de espesor y hasta 20 μm de longitud. De estos, emergen nanohilos que terminan en forma de garfio. La presencia de Er en los nanohilos no se observa mediante EDX ya que la concentración del mismo posiblemente se encuentra por debajo del límite de detección. Sin embargo, sí se detecta mediante micro-PL como muestra la emisión centrada en 543 nm correspondiente a la transición $4\text{S}_{3/2} \rightarrow 4\text{I}_{15/3}$ de los iones Er^{3+} .

Fig 3. Imagen SEM de nanoestructuras de Bi_2O_3 dopadas con ErFig 4. Espectro de micro-PL de las nanoestructuras de Bi_2O_3 dopadas con Er

REFERENCIAS:

1. L.Kumari et al. J.Phys.Condens.Matter **19** (2007) 406204.
2. P.Shuk et al. Solid State Ionics **89** (1996) 179-196.
3. H.T. Fan J.Phys D: Appl Phys **29** (2006) 1939-194
4. Betsch et al. Spectrochimica Acta **34** (1997) 505-514.

Synthesis and Magnetic Characterization of Transition Metal Ferrite Nanoparticles

N. Fontaiña-Troitiño,¹ M. Farle², V. Salgueirino,^{1*}

¹Departamento de Física Aplicada, Universidad de Vigo, 36310 Vigo (Spain);

²Experimentalphysik, Fakultät für Physik, Universität Duisburg-Essen, Duisburg (Germany);
vsalgue@uvigo.es

In the last decade interesting related magnetic properties have been reported for the nano-crystalline metal transition ferrites in which the implication of size and shape is well known. These materials are widely used in electronics industry; for the fabrication of components such as in memory devices, but also in ferrofluids, sensors and biomedical applications.

These magnetic nanostructures can be synthesized following a new wet-chemistry method based on the thermal decomposition of metal precursors and on their growth controlled by amines [1-2].

Herein we report on the synthesis of zinc (ZnFe_2O_4) and cobalt (CoFe_2O_4) ferrites nanostructures (with cubooctahedron and spherical shapes respectively) in view of the magnetic properties that can be attained. This magnetic behavior directly depends on parameters such as size, shape or polydispersity, which can be controlled by the synthesis conditions.

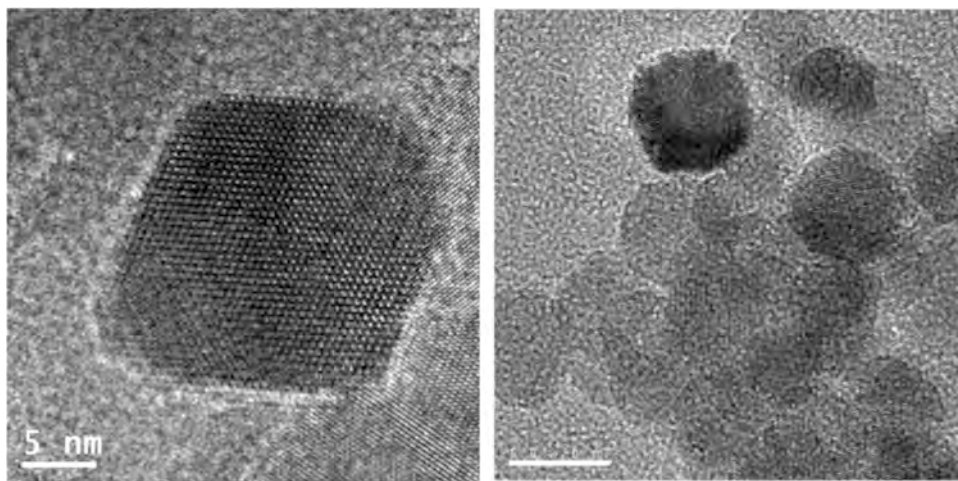


Figure 1. HRTEM image of ZnFe_2O_4 (left) and CoFe_2O_4 (right)

REFERENCES:

1. Greene, L. E.; Yuhas, B.; Law, M.; Zitoun, D.; Yang, P.; **19** (2006) 7535
2. Yuhas, B.; Zitoun, D.; Pauzauskie, P. J.; He, R.; Yang, P.; *Angewandte Chemie*, **45** (2006) 420.

Thermal variation of Electrical Resistivity and Magnetoresistance of diluted Fe-M=Au, Ag, Cu thin films

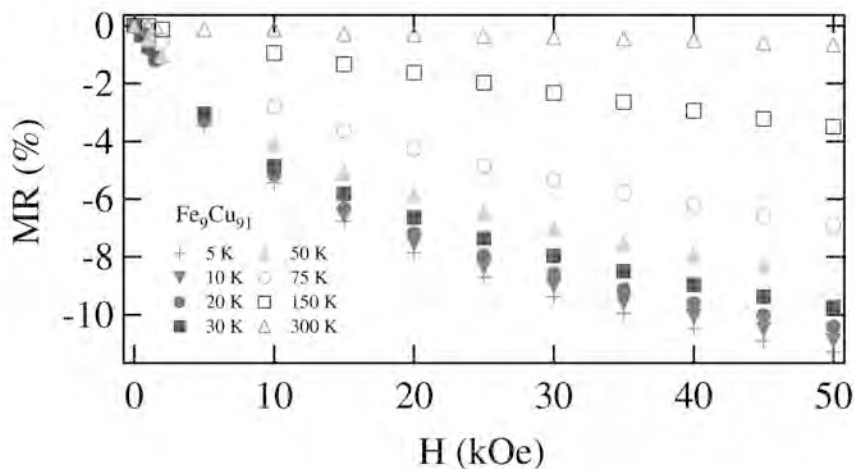
D. Alba Venero¹, L. Fernández Barquín¹, L. Rodríguez Fernández², J. Alonso³, M. L. Fdez-Gubieda³, A. Svalov³

¹ DCITIMAC. Facultad de Ciencias, Universidad de Cantabria, 39005 Santander, Spain

² SERTEM, Servicios Generales UC, Universidad de Cantabria, 39005, Santander, Spain

³ Depto. Elec. y Electrónica, Universidad del País Vasco 48080 Bilbao, Spain

We have produced thin (around 100 nm thick) films of $\text{Fe}_x\text{M}_{100-x}$, $\text{M} = \text{Au}, \text{Ag}, \text{Cu}$ with $x < 20$ at. %, on an Si substrate by DC-sputtering deposition. The TEM and HRTEM show the existence of a nanogranular structure with an ill-defined clustering of Fe and the noble metal at the nanoscale. The Fe-clustering is confirmed by magnetoresistance (MR) measurements displaying a decrease of the resistivity with applied field reaching a maximum value of 10 % ($H = 50$ kOe) at $T = 5$ K in $\text{Fe}_9\text{Cu}_{91}$. The scaling of MR with $(M/M_s)^2$ is not followed by the alloys except for that Fe-Cu film. The thermal variation of the resistivity shows a metallic (increasing) behaviour with an inflection point. No Kondo minimum is found at low temperatures ($T < 50$ K) and the large residual resistivity value is especially revealing of a disordered atomic state in the alloys. The data were studied using a Grüneisen-Bloch dependence and a magnetic term following the Matthiessen's rule. The magnitude of such a magnetic term is extremely low.



Transporte eléctrico a través de impurezas individuales en nanoestructuras de silicio

M.F.González-Zalba¹, D.Heiss¹, A.J.Ferguson¹, D.Williams²

¹Cavendish Laboratory, University of Cambridge, Cambridge CB3 0HE, United Kingdom. mg507@cam.ac.uk

²Hitachi Cambridge Laboratory, Cambridge CB3 0HE, United Kingdom

Apartado1: Transporte eléctrico a través de átomos de arsénico en barreras túnel en silicio

Hemos estudiado las propiedades eléctricas de barreras túnel en gases bidimensionales de electrones MOSFET en silicio-óxido de silicio [1] ligeramente dopadas con arsénico ($p < 10^{17} \text{cm}^{-3}$) y demostrado transporte eléctrico a través de una sola impurezas localizadas en la barrera túnel. Los resultados muestran una disminución considerable de la energía de carga ($E_c \sim 30 \text{meV}$) con respecto a los valores conocidos en el volumen ($E_c = 51.71 \text{meV}$) [2]. Este hecho se debe a la interacción de la función de onda del electrón localizado en la impureza con los electrodos superficiales que definen la nanoestructura que modifican su medio electrostático, en concordancia con estudios previos [3]

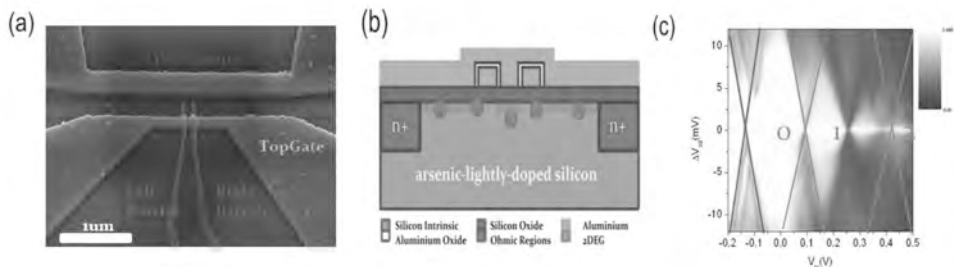


Figura 1. (a) Fotografía SEM de las barreras túnel definidas mediante electrodos de aluminio. (b) Esquema de una sección transversal de la estructura. Un potencial eléctrico positivo en TopGate define el gas bidimensional electrónico y un potencial inferior en las barreras reduce la densidad de electrones formando las barreras túnel. (c) Mapa de estabilidad de la barrera izquierda en el que se varía el voltaje en la fuente y en la barrera izquierda. La conducción eléctrica solo es posible a través de niveles de energía de la impureza delimitados por la línea roja (As1) y verde (As2). Los números indican la ocupación electrónica en una de las impurezas As2.

Por otro lado hemos medido energías de ionización considerablemente mayores ($E_i \sim 120 \text{meV}$) que los valores establecidos para el volumen ($E_i \sim 53.76 \text{meV}$) [1]. Atribuimos esta notable discrepancia al hecho de que el transporte eléctrico no se realiza a través de una sola impureza sino a través de un cluster de dos o más átomos de arsénico que forman complejo molecular por acoplo túnel (As_n).

Estos sistemas pueden operarse como transistores MOSFET en el que la funcionalidad viene dada por un solo átomo posibilitando la miniaturización definitiva de los actuales componentes electrónicos. Igualmente, puede ser utilizado como un efectivo filtro de espín.

Apartado 2: Híbrido entre un átomo de arsénico y un quantum dot.

Demostramos transporte eléctrico secuencial a través un átomo de arsénico y un quantum dot en serie acoplados capacitivamente en la nanoestructura de la Fig1(a) conformando una estructura novel: Un híbrido entre un átomo real y un átomo artificial.

En esta estructura es posible manipular independientemente la ocupación electrónica tanto en la impureza como en el quantum dot y modificar la energía de acoplo mediante las puertas de superficie de manera similar a los estudios en quantum dots laterales dobles en GaAs [4].

En el régimen de transporte lineal observamos transporte eléctrico únicamente en los puntos triples cuando los potenciales electroquímicos de ambos átomos están alineados

Estudios realizados en el régimen de transporte no lineal muestran los triángulos de conducción Fig. 2(b) e indican claramente transporte eléctrico a través de estados excitados en la impureza. Esto permite la realización de espectroscopia precisa de los estados energéticos de una sola impureza de arsénico a bajas energías.

Esta estructura, de gran interés para computación cuántica, puede significar un paso intermedio en el desarrollo del esquema de Kane de computación cuántica [5] basado en el espín nuclear de dos impurezas acopladas en silicio.

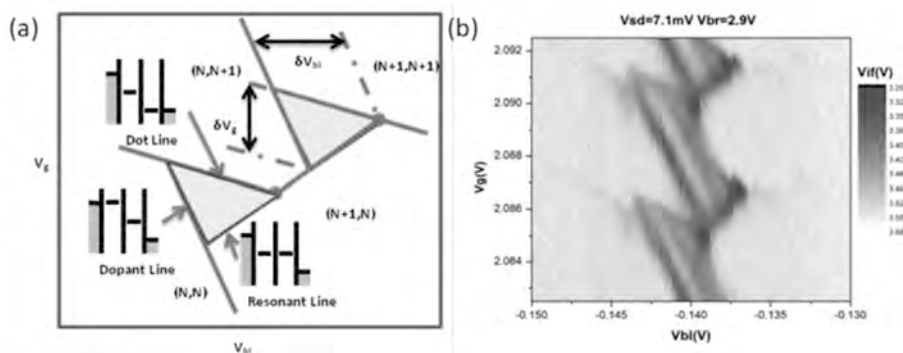


Figura 2.(a) Esquema de los triángulos de conducción asociados al transporte eléctrico a través de dos quantum dots en series acoplados capacitivamente cuando se varían los voltajes que controlan cada quantum dot independientemente. El transporte eléctrico solo está permitido cuando los potenciales electroquímicos de los quantum dots están alineados dentro de la ventana de conducción. (b) Medida experimental de los triángulos de conducción asociados al acoplo entre un átomo de arsénico y un quantum dot.

REFERENCIAS:

1. Angus, S.J., et al., *Gate-defined quantum dots in intrinsic silicon*. Nano Letters, 2007. **7**(7): p. 2051-2055.
2. Ramdas A.K., et al., *Spectroscopy of the solid-state analogues of the hydrogen atom*. Rep.Prog. Phys, 1981. 44 p. 1297-1387
3. Sellier, H., et al., *Transport spectroscopy of a single dopant in a gated silicon nanowire*. Physical Review Letters, 2006. **97**(20).
4. Hanson, R., et al., *Spins in few-electron quantum dots*. Reviews of Modern Physics, 2007. **79**(4): p. 1217-1265.
5. Kane, B.E., *A silicon-based nuclear spin quantum computer*. Nature, 1998. **393**(6681): p. 133-137.

Upconversion cooperativa de infra-rojo a visible en polímeros de coordinación con Yb(III), Eu(III) y Tb(III)

I. Hernandez^{1*}, N. Pathumakanthar^{1,2}, P.B. Wyatt², W.P. Gillin¹

¹Centre for Condensed Matter Physics, School of Physics, Queen Mary University of London, UK

*i.hernandez@qmul.ac.uk.

²School of Chemistry and Biological Sciences, Queen Mary University of London, UK

Abstract

This work reports the first observation of infra-red (IR) to visible upconversion (UC) via cooperative energy transfer in rare-earth containing coordination polymers. We analyze the basic design rules for materials showing this property and the involved processes in our systems, which are shown to perform similarly to inorganic glasses containing Yb³⁺-sensitized Tb³⁺ and Eu³⁺

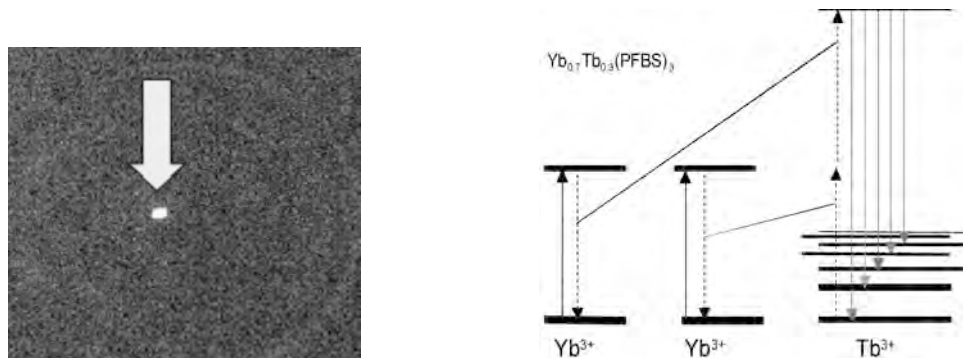


Figura 1. Imagen de la luminiscencia visible mediante excitación infra-roja (980 nm) para una muestra de $\text{Yb}_{0.7}\text{Tb}_{0.3}(\text{PFBS})_3$ y procesos asociados de transferencia cooperativa de excitación.

Introducción

La conversión de radiación infra-rojo en luz de más alta energía es un fenómeno de interés en numerosos campos, entre los que se incluyen aplicaciones para láseres, biomarcadores, iluminación, pantallas y celdas fotovoltaicas. La generación de armónicos o absorción multifotónica son técnicas tradicionalmente empleadas para este fin, pero que requieren altas potencias de excitación debido a que se basan en procesos no lineales de interacción radiación-materia. La UC mediante absorción de estados excitados o transferencia de energía entre centros ópticos representa una interesante alternativa que involucra un hamiltoniano radiación-materia de primer orden y, por consiguiente, puede ocurrir a más bajas potencias. Fenómenos de UC eficientes son relativamente conocidos en materiales aislantes activados ópticamente mediante impurezas trivalentes de tierras raras [1]. En estos sistemas, los procesos de UC se originan en las transiciones entre estados f de estos iones, y son favorecidos por los largos tiempos de vida de dichos estados, que permiten absorciones adicionales y transferencia de excitación entre centros. Sin embargo, las tierras raras son poco solubles en la mayoría de materia-

les inorgánicos, lo que limita las concentraciones de centros ópticos en los materiales matriz. Junto al hecho de que las transiciones f-f están mayormente prohibidas, estas limitaciones resultan en modestas actividades ópticas.

Materiales en los que las tierras raras se coordinan directamente con ligandos orgánicos representan una alternativa prometedora a los materiales inorgánicos, puesto que permiten un fino control de las concentraciones y la excitación de las tierras raras a partir de transiciones permitidas en la parte orgánica (efecto antena) [2]. Estas ventajas, unidas a la procesabilidad de los materiales orgánicos han motivado una especial atención de los investigadores hacia materiales organolantánidos para aplicaciones ópticas. Sin embargo, hasta nuestro trabajo, los materiales orgánicos con tierras raras no resultaban suficientemente eficientes para aplicaciones de UC. Esto se debe principalmente a la presencia de osciladores de alta energía en los ligandos, que contribuyen a la desexcitación mayoritaria no radiativa de los estados electrónicos involucrados en los procesos de UC. Por ello, el uso de materiales de naturaleza orgánica para conversión de frecuencias quedaba reducido a generación de armónicos o a absorción multifotónica y la investigación de materiales organolantánidos para UC parecía infructuosa.

Resultados

Este trabajo reporta la emisión por UC cooperativa en Tb^{3+} y Eu^{3+} mediante excitación a baja energía en el Yb^{3+} en una familia de polímeros de coordinación. Los materiales empleados están basados en complejos ternarios de perfluorobutanatosulfonato (PFBS), con fórmulas $\text{Yb}_{1-x}\text{Tb}_x(\text{PFBS})_3$, e $\text{Yb}_{1-x}\text{Eu}_x(\text{PFBS})_3$ [3]. En esta comunicación discutimos las reglas que hemos seguido para implementarlas, que han sido obtenidas a partir de resultados previos en los que caracterizamos los mecanismos de relajación cruzada en este tipo de sistemas de alta eficiencia luminiscente [4].

A partir de la excitación en la absorción de Yb^{3+} a 980 nm y la transferencia cooperativa de dos centros de Yb^{3+} a un centro emisor a más alta energía, se obtienen emisiones en el azul y en el verde (y en el rojo en menor medida), en los compuestos de Yb/Tb^{3+} y en el rojo para los compuestos con Eu^{3+} . Estas emisiones son eficientes y observables a simple vista (figura 1). Hemos estudiado los procesos involucrados y cuantificado las eficiencias, que resultan comparables con las de materiales inorgánicos.

Nuestro trabajo activa una línea de investigación con mucho potencial para nuevos fenómenos y aplicaciones.

REFERENCIAS

1. Auzel, F., *Chem. Rev.* **104**, 139 (2004)
2. Comby, S., Bünzli, J.C.G. (2007). *Handbook On The Physics And Chemistry Of Rare Earths*, Vol. 37 (Eds: K. A.Gschneidner, Jr., J. C. G.Bünzli, V. K.Pecharsky). Elsevier. 217-
3. Hernandez, I., Pathumakanthar, N., Wyatt, P.B., Gillin, W.P., *Advanced Materials*, **22**, 5356 (2010)
4. Hernández, I., Tan, R.H.C., Pearson, J.M., Wyatt, P.B., Gillin, W.P., *J. Phys. Chem. B*, **113**, 7474 (2009)

Upconversion roja, verde y azul en Y_2BaZnO_5 y $\text{Gd}_2\text{BaZnO}_5$ dopados con Yb^{3+} , Er^{3+} , Ho^{3+} y Tm^{3+} .

I. Hernandez^{1*}, I. Etchart^{2,3}, M. Berarad³, M. Laroche³, A. Huignard³, M. N. Nordin³, W.P. Gillin¹, R.J. Curry⁴ and A.K. Cheetham²

¹ Centre for Condensed Matter Physics, Dept. of Physics, Queen Mary University of London, UK

*i.hernandez@qmul.ac.uk.

² Department of Materials Science and Metallurgy, University of Cambridge, UK

³ Advanced Technology Institute, University of Surrey, UK

⁴ Department of Physics, University of Surrey, UK

Abstract

This work reports the study of yellow (red/green), green and blue upconverters based on $\text{Yb}^{3+}/\text{Er}^{3+}$, $\text{Yb}^{3+}/\text{Ho}^{3+}$ and $\text{Yb}^{3+}/\text{Tm}^{3+}$ -doped Y_2BaZnO_5 and $\text{Gd}_2\text{BaZnO}_5$, the two first being the most efficient upconverting oxides based on the corresponding pair of ions. We analyze the dynamic processes involved in the visible emission upon direct and 980 nm excitation by means of a thorough study including different dopant concentrations and thermal dependence of the luminescence. White emitters through IR excitation are proposed, based on these materials.

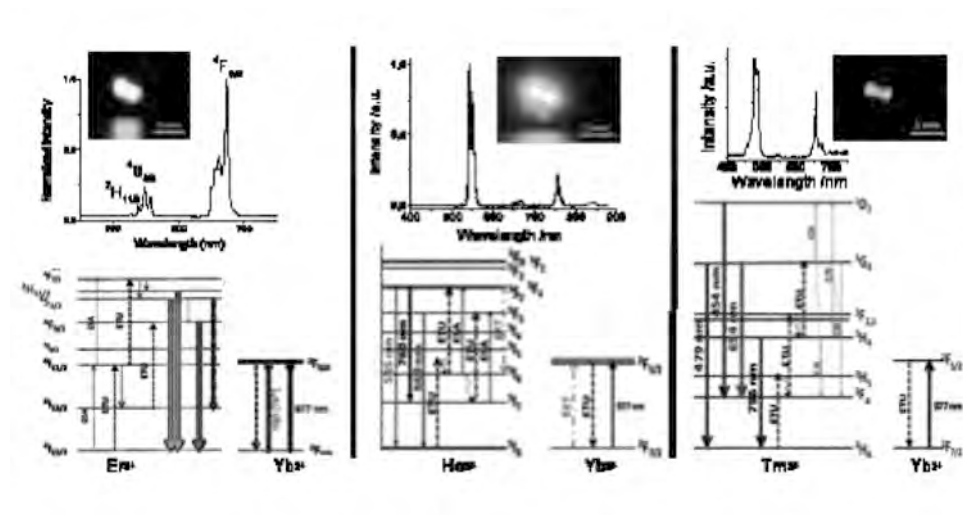


Figura 1. Imágenes y espectros de la luminiscencia visible correspondientes obtenidos mediante excitación infra-roja (980 nm) para las muestras de $\text{Y}_2\text{BaZnO}_5: \text{Yb}^{3+}/\text{RE}^{3+}$ ($\text{RE} = \text{Er}, \text{Ho}$ y Tm), junto a los procesos dinámicos asociados. En los esquemas, las flechas continuas representan absorción y emisión de luz y las discontinuas, transferencia de energía entre iones (ETU = Energy Transfer Upconversion, ESA = Excited State Absorption, BET = Back Energy Transfer, CR = Cross-Relaxation.). Los estados multielectrónicos surgidos de la correspondiente configuración $4f^n$ de cada ion RE^{3+} aparecen etiquetados con la notación $25+L_f$, en escala relativa al estado fundamental.

Introducción

La conversión de radiación infra-roja en luz de más alta energía es un fenómeno de interés en numerosos campos, entre los que se incluyen aplicaciones para láseres, biomarcadores, iluminación, pantallas y celdas fotovoltaicas. La upconversion (UC) mediante absorción de estados excitados o transferencia de energía entre centros ópticos es un fenómeno relativamente eficiente para este fin, incluso a bajas potencias de excitación. Los materiales aislantes activados ópticamente mediante impurezas trivalentes de tierras raras pueden mostrar significativa UC si se eligen los dopantes y sus concentraciones de forma adecuada. En estos sistemas, los procesos de UC se originan en las transiciones entre estados f de estos iones, y son favorecidos por los largos tiempos de vida de dichos estados, que permiten absorciones adicionales y transferencia de excitación entre centros.

Varios procesos dinámicos de los estados excitados pueden ocurrir en estos materiales, algunos de los cuales contribuyen a la UC, mientras que otros la disminuyen, tal y como se ve en la figura 1. La eficiencia de UC y distribución espectral puede ser sintonizada mediante la ingeniería de dichos mecanismos.

Resultados

Este trabajo presenta un estudio espectroscópico de Y_2BaZnO_5 y $\text{Gd}_2\text{BaZnO}_5$ dopados con $\text{Yb}^{3+}/\text{Er}^{3+}$, $\text{Yb}^{3+}/\text{Ho}^{3+}$ and $\text{Yb}^{3+}/\text{Tm}^{3+}$ en el que se analiza la eficiencia y procesos de luminiscencia y transferencia de energía en función de la naturaleza y concentración de los dopantes. Mediante medidas de luminiscencia y de tiempo de vida, identificamos los procesos de sensitización a través de la absorción en el Yb^{3+} a 980 nm, absorciones de estados excitados y relajaciones cruzadas que definen la distribución espectral de la emisión de los diferentes materiales. Asimismo hemos determinado la eficiencia de UC para la excitación y encontrado que las matrices estudiadas proporcionan las mayores eficiencias en materiales óxidos para los pares Yb/Er e Yb/Ho observadas hasta la fecha.

El estudio térmico en las muestras con Er y Ho entre 80 y 600 K ha permitido obtener la contribución de cada proceso de forma precisa y observar un cambio de dinámica asociada a la emisión de UC en la que ésta pasa de ser gobernada por el tiempo de transferencia a ser gobernada por el tiempo de desexcitación intrínseco del nivel emisor.

En vista de las propiedades luminiscentes de los materiales estudiados, hemos producido emisores blancos de UC basados en Y_2BaZnO_5 y $\text{Gd}_2\text{BaZnO}_5$ tridopados con Yb^{3+} , Er^{3+} y Tm^{3+} y a partir de mezclas de materiales bidopados.

REFERENCIAS

1. Etchart, I., et al., *Journal of Materials Chemistry*, **20**, 3989 - 3994 (2010)
2. Etchart, I., Hernández, I., Huignard, A., Bérard, M., Gillin, W.P., Curry, R.J., Cheetham, A.K., *Journal of Materials Chemistry*, **21**, 1387-1396 (2011)
3. Etchart, I., Hernández, I., Huignard, A., Bérard, M., Laroche, M., Gillin, W.P., Curry, R.J., Cheetham, A.K., *Journal of Applied Physics*, **109**, 063104 (2011)
4. Etchart, I., et al., *Chemical Communications* (in press)

Vacancy induced magnetism in bilayer graphene

E. V. Castro¹, M. P. López-Sancho¹, and M.A.H. Vozmediano¹

¹ Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid-CSIC; pilar@icmm.csic.es.

Graphene, one atom thick layer of carbon atoms ordered in a honeycomb lattice, have aroused a great interest by its potential technological applications along with its unconventional low-energy electronic properties.

One of the potentially most interesting aspects of graphene for the applications and that remains up to now partially unexplored concerns the magnetic properties. Ferromagnetic order enhanced by proton irradiation has been observed in graphite samples¹ and demonstrated to be due to the carbon atoms by dichroism experiments². By now it is clear that the underlying mechanism leading to ferromagnetism in these carbon structures is the existence of unpaired spins at defects induced by a change in the coordination of the carbon atoms³. Intrinsic defects such as vacancies, edges, or topological lattice defects are known to be present in all samples and the dangling bonds induce localized magnetic moments. The honeycomb lattice is a bipartite lattice, made of two sets of atoms A and B, with particle-hole symmetry. There is a theorem by Lieb⁴ that provides a relation between the number of vacancies and the total spin of the ground state. The theorem states that, for a repulsive on-site Coulomb interaction, the total spin S of the ground state of a neutral bipartite lattice is equal to half the number of unbalanced atoms: $2S = N_A - N_B$. The physics underlining this theorem is governed by the zero energy states created by the vacancies or unpaired atoms of any origin.

In a previous work we investigated the magnetic properties of vacancy-induced localized states in bilayer graphene: two graphene sheets overlaid in the Bernal stacking where atoms A_1 of the top layer are sitting right on top of the B_2 atoms of the bottom layer, connected by the interlayer coupling γ_1 ; atoms B_1 and A_2 are not connected to atoms of the other layer. We showed that two nonequivalent vacancies, A_1/B_2 or B_1/A_2 , can appear in the Bernal stacking of graphene and the corresponding two zero energy states^{5,6} give rise to two different spin polarized local states⁵. The possibility offered by the bilayer graphene (BLG) of opening an energy gap in the spectrum, by applying an electric field, introduces the capability of tuning polarization of the system for experimentally accessible gate voltages⁵.

In this work we complete the previous analysis by including the possibility of having topological defects consisting of defective rings with an odd number of sides. These defects are ubiquitous in the graphitic structures and their presence breaks the bipartite nature of the lattice hence altering substantially the physics discussed previously. The BLG is described by the carbon π -band tight-binding Hamiltonian, which is known to be the simplest model which captures the physics of graphene. The magnetic behaviour is investigated including an on-site Coulomb repulsion term. The calculation is performed with the unrestricted Hartree-Fock approximation of the Hubbard model, considering as the most relevant energy scales of the problem the in-plane hopping energy $t = 3\text{eV}$ and the interlayer hopping energy $\gamma_1 = 0.3\text{eV}$.

Including topological defects (pentagonal rings), which are known to frustrate the bipartite nature of the honeycomb lattice⁷, we have investigated the disorder effects on the magnetic behavior of the system. It is found that the presence of defects frustrating the sublattice symmetry can affect the magnetic properties of BLG. In our calculations,

the presence of a single pentagonal link alters the standard behaviour increasing the critical value of the Hubbard repulsion needed to obtain a polarized ground state.

REFERENCIAS

1. Barzola-Quiquia J., Esquinazi P., Rothermel M., Spemann D., Butz T. and García N., Phys. Rev. B **76**, 161403(R)-1-4 (2007)
2. Ohldag H., Tyliczszak T., Höhne R., Spemann D., Esquinazi P., Ungureanu M. and Butz T., Phys. Rev. Lett. **98**, 187204-1-4 (2007)
3. Kusakabe K. and Maruyama M., Phys. Rev. B **67**, 092406 (2003)
4. Lieb E. H., Phys. Rev. **62**, 1201-1204 (1989)
5. Castro E. V., López-Sancho M. P. and Vozmediano M. A. H. New J. Phys., **11**, 095017-1-8 (2009)
6. Castro E. V., López-Sancho M. P. and Vozmediano M. A. H., Phys. Rev. Lett **104**, 036802-1-4 (2010)
7. López-Sancho M. P., De Juan F. and Vozmediano M. A. H., Phys. Rev. B **79**, 075413-1-5 (2009)

Simposio multidisciplinar-Óptica

Análisis de la transferencia de átomos fríos en una doble trampa magneto-óptica

M. M.Valado¹, A.V. Carpentier¹, H.Michinel¹, J.A. Nóvoa¹, D. Nóvoa¹, J.R. Salgueiro¹.

¹Área de Óptica, Facultad de Ciencias, Campus As Lagoas, Ourense, Universidad de Vigo.

Montaje experimental.

Hemos diseñado un experimento para obtener un condensado de Bose-Einstein (CBE) con átomos de ^{87}Rb . Aprovechando el montaje, hemos desarrollado un método para transferir átomos desde una trampa magneto óptica (TOM) a otra [1].

Nuestro sistema está formado por dos celdas de vidrio conectadas por un tubo de vacío diferencial. En el centro de cada una de ellas se encuentra alineada una TOM. Ambas celdas presentan una configuración de tres haces ortogonales retrorreflejados obtenidos a partir de dos láseres de diodo de cavidad extendida sintonizable. Dos bobinas de cobre, que funcionan en configuración anti-Helmholtz proporcionan en la celda VUA un campo magnético de 15G/cm a lo largo de su eje de simetría, el cual sirve para atrapar los átomos en dicha trampa. Además de esto, es necesario un haz de empuje. Su misión consiste en forzar a los átomos a desplazarse hacia la segunda trampa, donde son recapturados. Este haz es divergente, está linealmente polarizado y horizontalmente alineado y centrado a la celda. Debido a su divergencia, su potencia en la segunda celda es menor que en la primera. Esto puede ocasionar que el centro de la celda VUA puede desplazarse ligeramente.

Análisis experimental

En este trabajo han sido analizados dos métodos de transferencia atómica: continua, es decir, a un valor de frecuencia fijo; o bien, barriendo un rango de frecuencias del espectro del rubidio. Escogiendo esta opción, el láser se comporta como si estuviese emitiendo pulsos, de ahí que, denominemos transferencia pulsada a dicha configuración[2 , 3]. Para cada caso, hemos probado dos regímenes distintos para el funcionamiento del haz de empuje [4]. Por un lado tenemos un régimen de intensidad débil y cercano a la resonancia y, por otro, tenemos el régimen de intensidad moderada y fuertemente desintonizado al rojo. Aprovechando que no es necesario hacer variaciones en el montaje experimental, se han realizado estas comparaciones para dos especies atómicas: Rb^{85} y Rb^{87} . En el caso del régimen de intensidad débil (Fig.1), hemos visto que la efectividad del atrapamiento es mayor a una potencia del haz de empuje de $80\mu\text{W}$, tanto para el Rb^{85} como para el Rb^{87} . En el caso del régimen de intensidad moderada (Fig.2), un valor de potencia en el que hemos visto un atrapamiento efectivo es a 5mW . En cuanto al método de transferencia, los resultados nos demuestran que, para ambos regímenes de intensidades, la transferencia continua consigue un atrapamiento de átomos mucho más eficiente que la pulsada (no representada en las imágenes) para ambas especies atómicas.

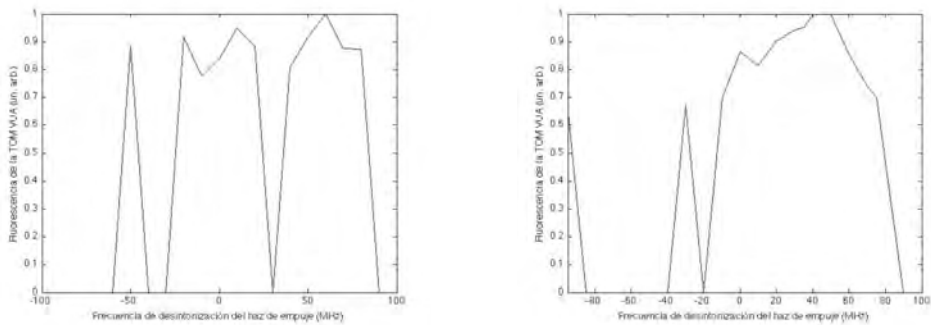


Figura 1. Transferencia atómica en régimen de intensidad débil cercano a la resonancia, para el Rb^{87} (izda) y el Rb^{85} (dcha). Potencia del haz de empuje = $80\mu\text{W}$. La transferencia atómica continua está representada por la línea de trazo continuo. Los valores de intensidad defluorescencia están normalizados.

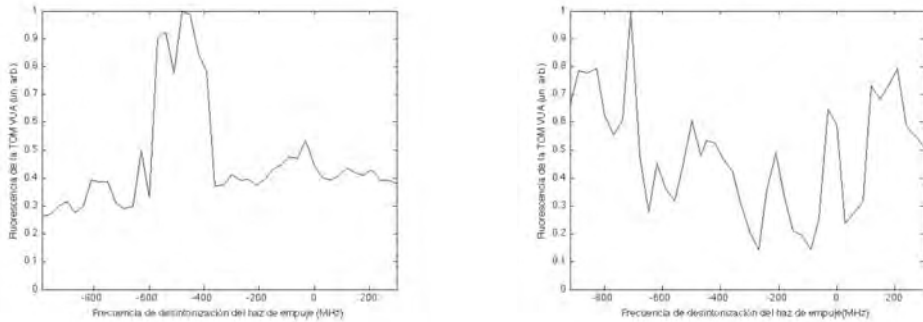


Figura 2. Transferencia atómica en régimen de intensidad moderada y fuertemente desintonizado al rojo, para el ^{87}Rb (izda) y el ^{85}Rb (dcha). Potencia del haz de empuje = 5mW . La transferencia atómica continua está representada por la línea de trazo continuo. Los valores de intensidad defluorescencia están normalizados.

REFERENCIAS

1. Wohlleben W., Chevy F., Madison K. and Dalibard J., *Eur. Phys. J.D.*, **15**, 237-244 (2001)
2. Cacciapuoli L., Castrillo A., de Angelis M. and Tino G.M., *Eur. Phys. J.D.*, **15**, 245-249 (2001)
3. Ram S.P., Tiwari S.K. and Mishra S.R., *J. of the Korean Phys. Soc.*, **5**, 1303-1307 (2010)
4. Wang J., Wang J., Yan S., Geng T. and Zhang T., *Rev. Sci. Instrum.*, **79**, 123116 (2008)

Caracterización de la altura de tropopausa química. Comparación con la altura de la tropopausa térmica y dinámica

G. Sáenz¹, M. García-Chamorro¹, D. Barriopedro² y J. A. García¹

¹Departamento de Física, Universidad de Extremadura; guadalupesaenz@unex.es

²Faculdade de Ciências, UCGUL-IDL, Lisboa; dbarriopedro@fc.ul.pt

La tropopausa es la capa límite que separa la troposfera de la estratosfera, dos capas atmosféricas con propiedades muy diferentes. Tradicionalmente se ha considerado como el límite entre la troposfera, una capa de baja estabilidad asociada a la rápida mezcla vertical, y la estratosfera, una capa de alta estabilidad asociada al lento transporte vertical [1]. Así, desde el punto de vista dinámico la tropopausa puede ser caracterizada a través de la estabilidad estática vertical de la atmósfera (la tropopausa térmica) [2] o de valores de vorticidad potencial isentrópica (la tropopausa dinámica) [3]. Desde un punto de vista químico puede ser caracterizada a partir de valores del gradiente vertical de concentraciones de ozono [4] o mediante la relación entre las concentraciones de un gas de origen troposférico (H_2O , CO , NO_x) y otro gas de origen estratosférico (O_3) [5] (la tropopausa química).

A partir de datos de reanálisis (ERA-40), proporcionados por el Centro Europeo de Predicción Meteorológica, se caracterizó la altura de la tropopausa química y se realizó un estudio climatológico comparativo de dicha altura con las alturas de la tropopausa térmica y dinámica, para el Hemisferio Norte y el periodo comprendido entre (1960-2001).

Para la caracterización se consideraron diferentes metodologías. Se eligió la metodología basada en la relación entre las concentraciones de un gas traza de origen troposférico, el vapor de agua (H_2O) y otro de origen estratosférico, el ozono (O_3).

En los perfiles de ozono y vapor de agua, se observó un rápido cambio alrededor de la tropopausa térmica, indicando que ésta puede marcar el límite químico entre la estratosfera y la troposfera.

Esta hipótesis también se ve apoyada al representar las concentraciones de los dos gases traza una frente a otra, las cuales forman una especie de “L”, como puede verse en la Figura 1. El aire estratosférico forma la rama vertical de la “L”, con un rápido incremento del gas traza estratosférico (O_3) y valores de baja concentración y poca variabilidad del gas traza troposférico (H_2O) en la estratosfera. El aire troposférico forma la rama horizontal de la “L” de

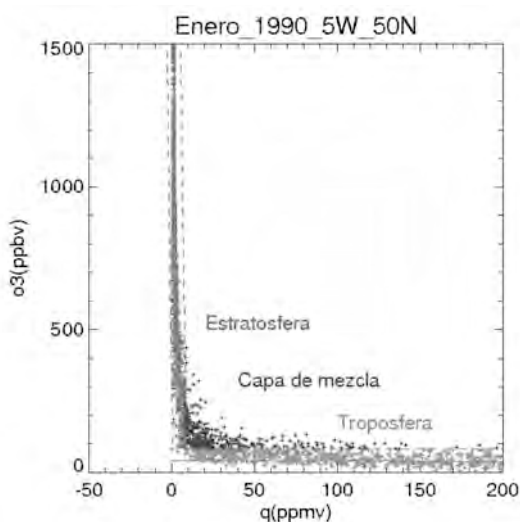


Figura 1. Relación entre las concentraciones del gas traza estratosférico O_3 y el gas troposférico H_2O .

forma similar. La zona de conexión entre las dos ramas proporciona información sobre las características de la transición, la capa de mezcla, y por tanto de la localización de la tropopausa por su propia definición.

Inicialmente se establecieron unos criterios o límites para caracterizar el aire estratosférico y troposférico en la relación H_2O-O_3 . Los valores que estaban fuera de estos criterios se consideraron parte de la capa de mezcla y la altura de la tropopausa química se calculó como el valor medio de las alturas de los puntos de la capa de mezcla.

A través del estudio de campos medios, variabilidad y variación latitudinal de la altura de la tropopausa química se observó que ésta se encontraba aproximadamente a 1 km por debajo de las alturas de la tropopausa térmica y dinámica pero con mayor variabilidad que estas últimas. Se obtuvieron correlaciones de 0.9 para latitudes superiores a los 50° N entre las alturas calculadas a través de las diferentes definiciones.

Agradecimientos al Ministerio de Ciencia e Innovación por la financiación del proyecto de investigación CGL2007-65891-C05-05/CLI, a la Junta de Extremadura, al Fondo Social Europeo y al Fondo Europeo de Desarrollo Regional.

REFERENCIAS

1. Holton, J. R., Haynes P.H y McIntyre, M.E., *Reviews of Geophysics*, 33,403-439(1995)
2. WMO, *Meteorology- A three-dimensional science*, WMO Bull, 6, (Oct), 134-138(1957).
3. Hoink, K.P., *American Meteorological Society*,126, 3303-3325(1998).
4. Bethan, S., *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*,122, 929-944(1996).
5. Pan, L.L., Gary, B.L., Mahoney, M.J., Hints, E.J., *Journal of Geophysical Research*, 109, doi:10.1029/2004JD004982(2004).

Caracterización de la UVER con diferentes tipos de nubes

David SERRANO¹, María José MARÍN², María Pilar UTRILLAS¹, Fernando TENA¹,
José Antonio MARTÍNEZ-LOZANO¹

¹Grupo de Radiación Solar. Departament de Física de la Terra i Termodinàmica, Universitat de València, Dr. Moliner 50, 46100 Burjassot, Valencia.

²Departament de Matemàtiques per a l'Economia i l'Empresa, Universitat de València, Avda. Tarongers s/n, 46022 Valencia, Spain.

Introducción

La sobreexposición a la radiación solar UV tiene una gran influencia sobre la salud humana. El efecto más común es el eritema o quemadura solar. La CIE (Commission Internationale de l'Éclairage) adoptó en 1987 una curva estándar de eritema [1] que es utilizada para determinar la radiación solar UV eritemática (UVER). Entre los factores que atenúan esta radiación se encuentra la nubosidad [2].

Instrumentación

Para la medida de la UVER hemos utilizado el radiómetro YES-UVB-1 que tiene un rango espectral entre los 280 y 400 nm y una respuesta espectral próxima al espectro de acción eritemático. El sensor es sometido a un calibrado estándar anualmente en las instalaciones del Instituto Nacional de Técnica Aeroespacial (INTA) [3].

En cuanto al registro de la nubosidad, disponemos de una cámara de nubes automatizada SONA SIELTEC S.L. que registra imágenes de toda la bóveda celeste cada 5 minutos, para obtener una buena caracterización de la cubierta nubosa. Está compuesta por una carcasa de aluminio, una lente de ojo de pez con un captador de imágenes basado en un sensor CCD, una banda sombreadora que impide la saturación del sensor CCD debido a la entrada directa de luz del sol, así como de un sistema de control de la temperatura. Esta cámara está en funcionamiento desde noviembre de 2010.

Resultados

El objetivo de este trabajo ha sido calcular el porcentaje que disminuye la UVER con diferentes tipos de nubosidad, respecto a un día totalmente despejado, determinando tanto el promedio diario como el promedio de una hora centrada en las 12 GMT, a partir de las medidas del radiómetro YES-UVB-1. Para ello hemos seleccionado tres días con cobertura nubosa total, representativos de nubosidad de tipo alto, medio y bajo, así como los días despejados más próximos que nos sirven de referencia, para poder calcular la atenuación de la UVER.

Para nubes bajas hemos elegido el 15 de febrero de 2011 y como día despejado el 14 de febrero de 2011, para nubes medias el 19 de febrero de 2011 y el 18 de febrero de 2011 como despejado, y por último, para nubes altas el 19 de Enero de 2011 y como día despejado de referencia el 21 de Enero de 2011. La cobertura nubosa en los días nubosos seleccionados es total, es decir 8 octas. En la Figura 1 se muestran las imágenes captadas por la cámara de nubes para las 12 horas en el día con nubes bajas (15/02/2011) y en el día despejado correspondiente (14/02/2011).

En la Tabla 1, se muestra el porcentaje de la UVER incidente en los días nubosos seleccionados con respecto al día despejado de referencia. Se ha tenido en cuenta que

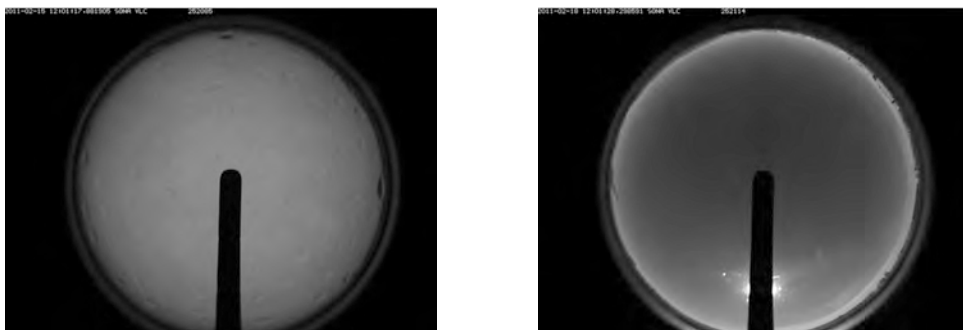


Figura 1. Imágenes de la cámara de nubes, a las 12 horas, para el día con nubes bajas (15/02/2011) y despejado (14/02/2011).

entre el día nublado y el correspondiente día despejado la variación de la columna total de ozono no es significativa. También se ha incluido en la Tabla 1, los porcentajes de UVER para los distintos tipos de nubosidad propuestos por la Acción Cost-713 [4].

% UVER	Nubes altas	Nubes medias	Nubes bajas
Promedio diario	100	70	40
Promedio de una hora centrada en las 12 h	100	60	30
Acción Cost-713	90	50	20

Conclusiones

El porcentaje de la UVER, para el mediodía GMT, en el caso de días con cobertura nubosa total es el 100% de un día despejado, en el caso de nubes altas, del 60% en el caso de nubes medias y del 30% en el caso de nubes bajas. Estos datos son comparables con los propuestos en la Acción COST-713, aunque algo superiores, y aumentan un poco más si consideramos el valor promedio diario.

AGRADECIMIENTOS: Este trabajo ha sido financiado por el Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN) a través de los proyectos CGL2009-07790 y CGL2007-60648 y por la Generalitat Valenciana a través del proyecto PROMETEO-2010-064.

REFERENCIAS

1. McKinlay, A.F., and Diffey, B.L: A reference spectrum for ultraviolet induced erythema in human skin, CIE Journal, **6**, 17-22. (1987)
2. Esteve, A.R., Marín, M.J., Tena, F., Utrillas, M.P., and Martínez-Lozano, J.A.: Influence of cloudiness over the values of erythema radiation in Valencia, Spain, International Journal of Climatology, 30:127-136. (2010)
3. Vilaplana, J., Cachorro, V., Sorribas, M., Luccini, E., de Frutos, A., Berjón, A., and de la morena, B: Modified calibration procedures for a Yankee Environmental System UVB-1 biometer based on spectral measurements with a Brewer spectrophotometer, Photochemistry and Photobiology, **82**, 508-514. (2006)
4. Vanicek, K., Frei, T., Litynska, Z., and Shnalwieser, A.: UV-Index for the public, COST-713 Action (UV-B Forecasting), Brussels, 27p.

Caracterización de Medios Ópticos mediante la Descomposición Polar de la Matriz de Mueller

J. M. Sanz¹, J. M. Saiz, F. Moreno, F. González

¹Grupo de Óptica, Depto. De Física Aplicada, Universidad de Cantabria; sanzjm@unican.es

1. Introducción:

La luz se utiliza habitualmente como una herramienta no invasiva para obtener información de la materia a través de su interacción. Como onda electromagnética, la luz puede estar polarizada, y es posible que su estado de polarización se vea afectado por el proceso de interacción. El análisis de esa modificación corresponde a la polarimetría, cuyo objeto es relacionar el estado de polarización de un haz de luz que incide sobre un sistema material bajo análisis con el de la luz emergente del mismo [1].

Desde el punto de vista polarimétrico, las características de estos haces se relacionan a través de la matriz de Mueller, una matriz 4x4 que contiene toda la información polarimétrica del sistema en cuestión. Sin embargo, esta información aparece encriptada en las múltiples ligaduras existentes entre sus 16 elementos. El método de descomposición polar es una potente herramienta muy utilizada que facilita el estudio de sistemas matriciales complejos. Mediante su aplicación, un sistema óptico puede ser caracterizado por medio de nuevos parámetros independientes, con un riguroso sentido físico.

2. El Método de Descomposición Polar (PD):

La matriz de Mueller de un sistema óptico cualquiera, puede descomponerse como [2]:

$$M_{4 \times 4} = M_{\Delta} \cdot M_R \cdot M_D,$$

donde M_{Δ} es la matriz del despolarizador o matriz de despolarización, que se puede describir, en el caso más general, en términos de sus coeficientes de despolarización (a_i y d_i) y de polarizancia (p_i) tal y como se detalla a continuación:

$$M_{\Delta} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ p_1 & d_1 & a_1 & a_2 \\ p_2 & a_1 & d_2 & a_3 \\ p_3 & a_2 & a_3 & d_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \vec{0}^T \\ \vec{P} & m_{\Delta} \end{pmatrix}$$

$M_R = f(\phi, \delta, \rho)$ es la matriz de retardo, que se corresponde con un retardador elíptico cuyo eje rápido presenta un azimut ϕ con respecto al plano definido como plano de scattering, un retardo o desfase δ , y un ángulo de rotación ρ .

Finalmente, $M_D = f(m_{00}, t_p, \alpha, \beta)$ es la matriz de diatenuación, en la cual α representa el azimut de un hipotético eje 1 del diatenuador con respecto al plano que definimos como plano de scattering, t_p es la transmitancia a través de ese mismo eje, m_{00} es la transmitancia total del sistema para luz incidente despolarizada, y β es la elipticidad introducida por el diatenuador. El sistema equivalente es, por tanto, el producto de tres sistemas virtuales con estricto sentido físico, cuya evolución viene determinada por el comportamiento de las distintas magnitudes polarimétricas definidas hasta el momento.

3. Caracterización de Sustancias Quirales y Medios Densos:

La simulación del comportamiento de los tejidos biológicos para la obtención de datos “*in vivo*” está siendo el objeto de diversos análisis polarimétricos recientes de grupos de investigación en biología y medicina [3]. El carácter quiral y de medio denso (es decir, dispersor y selectivamente absorbente) de los tejidos puede ser simulado mediante disoluciones de sales o azúcares en sustancias que contienen partículas en suspensión. La fase en suspensión otorgaría el carácter denso y la fase en disolución la actividad óptica.

En este apartado se muestra cómo el PD es capaz de establecer una relación entre el comportamiento de estos medios (α -glucosa en agua, con y sin partículas en suspensión) y el parámetro ρ del PD (Fig. 1).

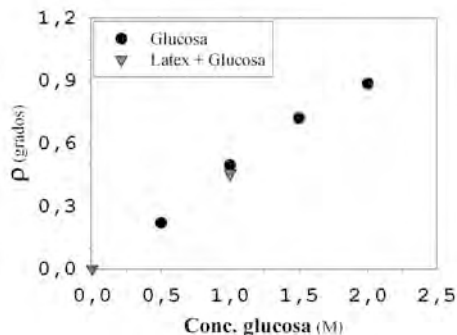


Figura 1. Evolución de la rotación ρ introducida en el haz luminoso en función de la concentración de glucosa en la suspensión acuosa.

4. Caracterización de Componentes Ópticos:

Las características polarimétricas de los componentes ópticos de propósito general son de gran importancia, y su defectuosa caracterización es un problema frecuente. La posibilidad de obtener con precisión el perfil transversal de las propiedades polarimétricas de elementos básicos, como son las láminas retardadoras y los polarizadores, y el uso de algoritmos para optimizar el rendimiento de los mismos, es una de las aplicaciones directas de los polarímetros [4].

En concreto, se ha aplicado el PD a medidas realizadas sobre dos típicos componentes polarimétricos: Un polarizador dicróico y una lámina retardadora ($\lambda/4$) de orden cero a 633 nm. Las medidas se hicieron en distintos puntos a lo largo de la superficie de ambos elementos, con objeto de mostrar la capacidad del PD para elaborar *mapas transversales* con los valores más representativos de cada elemento (Fig. 2).

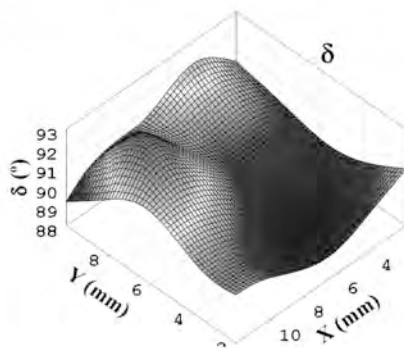


Figura 2. Desfase δ introducido en el haz luminoso por una lámina $\lambda/4$ (área analizada: 10x12 mm).

REFERENCIAS

1. E. Collett. *Polarized Light: Fundamentals and Applications*. Marcel Dekker, Inc. New York, 1993.
2. S.Y. Lu et al. *Interpretation of Mueller matrices based on polar decomposition*. JOSA A, 13:5 (1996).
3. N. Ghosh et al. *Mueller matrix decomposition for polarized light assessment of biological tissues*. J. Biophoton., 2:3 (2009).
4. M. Smith. *Polarization metrology moves beyond home-brewed solutions*. Laser Focus World, 40:10 (2004).

Caracterización óptica de vidrios para su utilización en módulos fotovoltaicos

J. L. Balenzategui¹, B. Asenjo², F. Chenlo³

Departamento Energías Renovables, CIEMAT. Avda. Complutense 22, 28040-Madrid (Spain)

¹j.l.balenzategui@ciemat.es.

²mbegona.asenjo@ciemat.es.

³faustino.chenlo@ciemat.es.

Uno de los objetivos de que se pretende con este trabajo es determinar las propiedades ópticas de los vidrios utilizados como cubierta frontal en módulos fotovoltaicos y su capacidad para ser utilizados como elementos de construcción, especialmente para aplicaciones en fachadas acristaladas y muros cortina.

Se han caracterizado ópticamente varias muestras representativas de los materiales y modelos que se están utilizando actualmente para determinar sus propiedades. En la Tabla I se resumen las características principales de varias muestras individuales de vidrios y en la tabla II se resumen estructuras compuestas, realizados mediante combinación de vidrios de la Tabla I, con dos materiales encapsulantes diferentes: EVA (etileno vinil-acetato) ⁽¹⁾ y MMA (resina de metilo metacrilato) ⁽²⁾. Estas muestras triples son muy interesantes porque tienen las mismas propiedades ópticas de un módulo fotovoltaico completo.

<i>Nombre</i>	<i>Espesor. (mm)</i>	<i>Tamaño (cm²)</i>	<i>Características</i>
GS01	3.2	27.0 × 27.0	LI
GS02	3.2	10.0 × 10.0	CD LI CT
GS03	3.2	2.54 × 2.54	LI
GS04	3.2	2.54 × 2.54	CD LI TT
GS05	0.2	10.0 × 10.0	Tedlar transparente
GS06	4.0	5.0 × 5.0	LI CT
GS07	4.0	5.0 × 5.0	LI UT
GS08	4.0	12.5 × 12.5	FG CT
GS09	3.2	12.5 × 12.5	CD LI TT
GS10	3.2	5.0 × 5.0	CD LI CT
GS11	3.2	15.0 × 30.0	SnO ₂ /TCO
GS12	4.0	15.0 × 30.0	FG
GS13	4.0	15.0 × 30.0	HG

Tabla 1. Descripción de las muestras individuales.

Códigos usados: LI = Vidrio con bajo contenido en Hierro; TT = Térmicamente templado; CT = Químicamente templado; UT = vidrio sin temprar; CD = Vidrio dopado con cerio; HG = Vidrio templado; FG = vidrio flotante o vidrio plano; TCO = Oxido conductor transparente.

<i>Nombre</i>	<i>Estructura</i>	<i>Tamaño (cm²)</i>
GT01	GS01/EVA/GS05	20.0 × 20.0
GT02	GS06/MMA 3mm/GS08	5.0 × 5.0
GT03	GS06/MMA 2mm/GS08	5.0 × 5.0
GT04	GS07/MMA 3mm/GS07	5.0 × 5.0
GT05	GS07/MMA 2mm/GS07	5.0 × 5.0
GT06	GS09/EVA/GS08	5.0 × 5.0
GT07	GS09/EVA/GS06	5.0 × 5.0

Tabla 2. Muestras compuestas

Se ha medido la transmitancia espectral a todas las muestras de las tablas I y II. En las muestras individuales no se observa gran diferencia entre ellas dependiendo de sus características así sucede en las muestras con bajo contenido de hierro (GS01, GS03) y tampoco existen modificaciones en las muestras que poseen vidrio templado (GS06 y GS07), mientras que en las muestras dopadas con cerio (GS04 y GS09) presentan algunas diferencias. Esta diferencia parece deberse principalmente a la textura de la superficie de estos vidrios y no a las posibles diferencias en su composición. En cambio, los valores de transmitancia medidos para las muestras GS08, GS12 y GS13 presentan gran similitud entre sí, por lo que las pequeñas diferencias encontradas sí pueden ser debidas a un contenido diferente de hierro y otros compuestos en el material del vidrio. Esto debería implicar también mayores valores de absorción. Hay que tener en cuenta que las tres muestras tienen el mismo grosor.

Aunque el análisis de estas propiedades es relevante para la optimización de la estructura del módulo fotovoltaico, resulta de mayor importancia en análisis de la transmitancia de un módulo completo en cuanto a sus potenciales efectos de cara a la iluminación interior de los edificios.

Respecto a las estructuras compuestas, hay que considerar que vidrios que se utilizan para ser la parte frontal de una estructura vidrio-vidrio compuesta están obligados a tener valores altos de transmisión para una producción energética adecuada, en el rango de 400-1100 nm pero podrían combinarse con un vidrio trasero con baja transmisión en la región IR del espectro en longitudes de onda superiores a 1200 nm para tratar de reducir los efectos de calentamiento en el interior del edificio ⁽³⁾. Así el vidrio más grueso podría ser el vidrio trasero de la estructura pero esto también implicaría mayor peso y mayor resistencia mecánica. En la práctica, el aumento en el grosor supone un aumento en el costo y la reducción ligera de infrarrojos por lo que puede no ser suficiente como para plantear esta modificación en la doble estructura de módulos de vidrio

REFERENCIAS

1. Pern . F, J. Solar Energy Materials and Solar Cells 41/42 587-615 (1996)
2. Gee, J M., Meakin, D., Spath, M., Bennett., I., Book Series: IEEE Photovoltaic Specialists, 2331-2335. (2009).
3. Silva, J.P., Balenzategui, J.L., Nieto, M.B., Proceedings of the 23rd European Photovoltaic Solar Energy Conference, .2861-2864.(2008).

Dinámica de Vórtices y Decaimiento de las Corrientes Persistentes Inducidas en S.A.T.

G. Briones¹, J.A. Novoa², I. Quelle³, G. Domarco¹, L. Romani¹

¹Física Aplicada - LFTyS, Universidad de Vigo.

²Física Aplicada – G. Óptica, Universidad de Vigo.

³Ingeniería de Procesos y Calidad, T-Solar.

Resumen

El estudio del decaimiento de las corrientes inducidas en S.A.T. durante periodos superiores a 1 mes[1] han permitido observar fenómenos que el modelo de Anderson no predice. En esta comunicación se propone una posible relación entre los fenómenos de decaimiento y estabilización de las corrientes y el movimiento de los vórtices magnéticos atrapados en el material.

La geometría y el método de inducción[2] nos permite inducir corrientes en los anillos con una mínima densidad de vórtices, consiguiendo que el campo generado por las corrientes sea la contribución dominante al campo total de cada anillo.

Los resultados obtenidos en los barridos de campo, la distribución debida solo a los vórtices parece que tiende a uniformizarse sobre la superficie de los anillos y, de forma muy sutil, el pico de máxima densidad parece alejarse del eje del anillo. Esto parece ser consecuencia de la acción sobre los vórtices de la fuerza de Lorentz debida a las corrientes.

REFERENCIAS

1. Anderson P.W., Kim Y.W., Rev. Mod. Phys., **36**, 39 - 43 (1964)
2. Quelle, I., González-Jorge, H., Domarco, G., EUCAS 2007, **97**, IOP Publishing Ltd (2008)

Direccionalidad de la difusión de luz por partículas esféricas: revisión de las condiciones de Kerker

B. García-Cámara, R. Alcaraz de la Osa, J. M. Saiz, F. González y F. Moreno

Universidad de Cantabria. Grupo de Óptica. Departamento de Física Aplicada.
Avda. de los Castros s/n
39005 Santander (Cantabria)

Desde la aparición de los nuevos materiales microestructurados (metamateriales), la investigación electromagnética de sistemas con permitividad eléctrica y permeabilidad magnética relativas distintas de 1 constituye un tema actual y de gran interés tanto desde puntos de vista teóricos como experimentales [1, 2, 3]. Estas propiedades inusuales involucran fenómenos de difusión no convencionales como refracción negativa o efectos de difusión direccional [4, 5]. Kerker y colaboradores fueron los primeros en analizar esto último en pequeñas esferas con valores arbitrarios de las constantes ópticas relativas (ϵ_r, μ_r) [5]. Estos autores establecieron que para $\epsilon_r = \mu_r$ se suprime la retrodifusión de luz. También, la difusión hacia delante puede suprimirse si $\epsilon_r = (4 - \mu_r)/(2\mu_r + 1)$. Han aparecido gran cantidad de trabajos de investigación tratando estas condiciones, conocidas como condiciones de Kerker [6]. En particular, parece que recientemente se ha resuelto una paradoja entre la condición de difusión hacia delante y el Teorema Óptico [7] analizando la influencia de la corrección radiativa [8] en la expresión de la polarizabilidad de un dipolo bajo la aproximación electrostática. Aquí proponemos, siguiendo los pasos de Kerker, nuevas condiciones revisadas para (ϵ_r, μ_r) tales que la partícula no solo no difunde en la dirección hacia delante o hacia detrás, sino que lo hace sin violar el Teorema Óptico. Las condiciones de Kerker se pueden expresar como función de las propiedades ópticas como antes, o como función de los dos primeros coeficientes de Mie (a_1, b_1), cuando éstos son dominantes. Entonces, la condición de scattering nulo hacia detrás se cumple cuando $a_1 = b_1$ y la de scattering nulo hacia delante cuando $a_1 = -b_1$. Considerando los coeficientes de Mie dipolares (a_1, b_1) con la corrección radiativa y aplicando las anteriores igualdades, hemos obtenido nuevas condiciones revisadas de Kerker

$$\text{Scattering nulo hacia detrás} \Rightarrow \epsilon_r = \mu_r \quad (1)$$

$$\text{Scattering nulo hacia delante} \Rightarrow \epsilon_r = \frac{\pi(4 - \mu_r) - iVk^3(\mu_r - 1)}{\pi(2\mu_r + 1) - iVk^3(\mu_r - 1)} \quad (2)$$

donde V es el volumen del difusor y k es el número de onda de la luz incidente.

Como puede verse, la condición de *scattering* nulo hacia detrás es idéntica a la establecida originalmente por Kerker. Por el contrario, para la condición de *scattering* nulo hacia delante, la corrección introducida fuerza que al menos una de las constantes ópticas sea compleja. Estas condiciones aseguran que los patrones de difusión de luz muestren un valor de cero en las direcciones de *backward* y de *forward* respectivamente, como puede verse en la Fig. 1. La corrección de tamaño para la segunda condición involucra una pequeña parte imaginaria bien en la ϵ_r o bien en la μ_r , la cual es, a su vez, negativa. Como consecuencia, la sección eficaz de absorción es negativa (Fig. 2) y entonces el difusor se convierte en un objeto activo [9]. Cuando se satisface la con-

dición de *scattering* nulo hacia delante, tanto la sección eficaz de *scattering* como la de absorción (amplificación) son iguales y de signo opuesto. Así, la sección eficaz de extinción ($C_{\text{ext}} = C_{\text{sca}} + C_{\text{abs}}$) es cero. Esto garantiza la consistencia con el Teorema Óptico, que relaciona la amplitud de *scattering* en la dirección hacia delante, $S(0^\circ)$, con la sección eficaz de extinción.

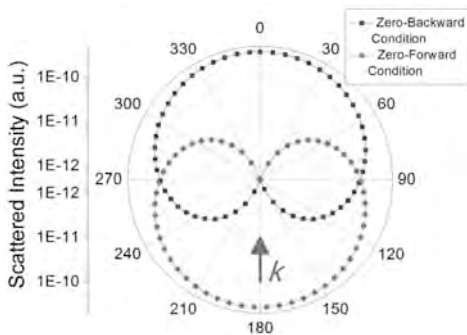


Fig. 1: Diagramas de *scattering* correspondientes a un difusor esférico ($R=5\text{nm}$) iluminado por una onda plana con $\lambda=500\text{nm}$ ($R/\lambda=0.01$) y cuyas propiedades ópticas cumplen o bien la nueva condición de *scattering* nulo hacia delante (2) $[(\epsilon, \mu)=(2, 0.4-3.88 \cdot 10^{-5}i)]$ o la condición de *scattering* nulo hacia atrás (1) $[(\epsilon, \mu)=(2, 2)]$. La flecha representa la dirección de la onda incidente. Sólo se considera polarización paralela al plano de *scattering* pues polarización perpendicular produce patrones similares.

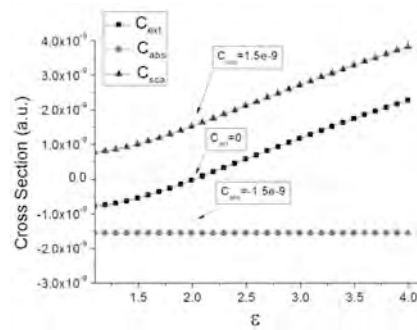


Fig. 2: Evolución de las secciones eficaces de *scattering*, absorción (amplificación) y extinción de una partícula esférica ($R=5\text{nm}$) iluminada por una onda plana ($\lambda=500\text{nm}$) en función de ϵ , estando la permeabilidad magnética fijada ($\mu=0.4-3.88 \cdot 10^{-5}i$). El par $(\epsilon, \mu)=(2, 0.4-3.88 \cdot 10^{-5}i)$ satisface la nueva condición de *scattering* nulo hacia delante (2).

Agradecimientos

Esta investigación ha sido financiada por el MICINN de España bajo el proyecto FIS2010-21984. R. Alcaraz de la Osa también quiere agradecer al MEC por su beca FPU.

REFERENCIAS

1. Grigorenko A.N., Geim A.K., Gleeson H.F., Zhang Y., Firsov A.A., Khrushev I.Y. and Petrovic J., *Nature*, **438**, 335-338 (2008).
2. García-Cámara B., Moreno F., González F., Saiz J.M. and Videen G., *J. Opt. Soc. Am.*, **25**, 327-334 (2008).
3. Chen H., Chan C.T. and Sheng P., *Nature Mat.*, **9**, 387-396 (2010).
4. Hess O., *Nature*, **455**, 299-300 (2008).
5. Kerker M., Wang D.-S and Giles C.L., *J. Opt. Soc. Am.*, **73**, 765-767 (1983).
6. García-Cámara B., Saiz J.M., González F. and Moreno F., *Opt. Commun.*, **283**, 490-496 (2010).
7. Alú A. And Engheta N., *J. Nanophoton.*, **4**, 041590 (2010).
8. Draine B.T. and Flatau P.J., *J. Opt. Soc. Am. A*, **11**, 1491-1499 (1994).
9. Alexopoulos N.G. and Uzunoglu N.K., *Appl. Opt.*, **17**, 235-239 (1987).

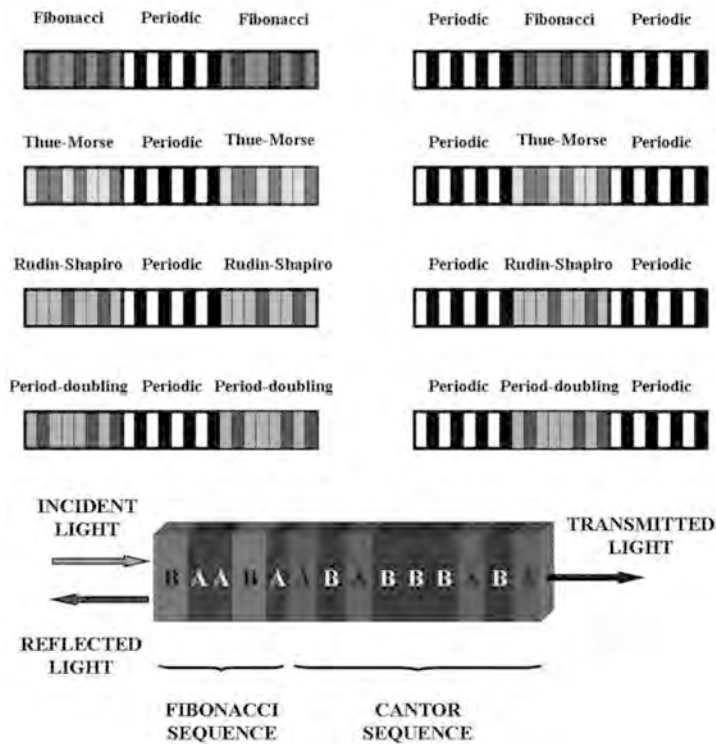
Dispositivos fotónicos basados en ordenamientos aperiódicos

Enrique Maciá

¹Dpto. Física de Materiales, Facultad CC. Físicas, Universidad Complutense de Madrid, E-28040, Madrid (Spain), emaciaba@fis.ucm.es.

A lo largo de los últimos años ha aparecido en las revistas especializadas un número creciente de trabajos dedicados al estudio del papel que los materiales ordenados según secuencias aperiódicas deterministas pueden jugar en las respuestas ópticas de diversos sistemas físicos [1]. La mayor parte de dichos artículos se refieren a la cuestión fundamental sobre si el tipo específico de ordenamiento aperiódico que se halla presente en los dispositivos considerados conlleva una mejora en las prestaciones frente a la que se obtendría mediante el uso de disposiciones periódicas más usuales para algunas aplicaciones específicas. El principio básico inspirador subyacente se puede explicar sencillamente si consideramos una estructura en capas que consista en un cierto número de láminas apiladas según un ordenamiento aperiódico. De este modo, se introducen en la misma muestra dos tipos de orden a diferentes escalas: a nivel atómico tenemos el orden periódico habitual determinado por la disposición cristalina de los átomos en cada capa, mientras que a una escala mayor encontramos el orden cuasiperiódico determinado por la deposición secuencial de las diversas capas. Este ordenamiento aperiódico de largo alcance puede imponerse artificialmente durante el proceso de crecimiento y controlarse de modo preciso. Dado que los diferentes procesos físicos implican sus propias escalas físicas relevantes, por medio de una selección adecuada de las escalas características podemos aprovechar eficazmente el orden aperiódico que hemos introducido en el sistema. Así pues, la posibilidad de diseñar dispositivos basados en un ordenamiento aperiódico del apilamiento de las diferentes capas introduce un grado de libertad adicional, relacionado con la presencia de dos tipos diferentes de orden en la misma estructura a distintas escalas espaciales, que proporciona nuevas vías de innovación tecnológica [2]. Por ejemplo, se pueden utilizar disposiciones laminares de multicapas dieléctricas aperiódicas a fin de diseñar microcavidades ópticas [3-5], espejos omnidireccionales [6], filtros de multibanda [7,8], intervalos de banda prohibida en cristales fotónicos [9-12], estructuras de guía de ondas [13] y muchos otros sistemas ópticos de interés.

Una nueva forma de aproximación a fin de obtener sistemas ópticos innovadores está también basada en la construcción de dispositivos con diseños modulares compuestos de multicapas ordenadas tanto periódica como aperiódicamente. Dichos dispositivos se pueden considerar como sistemas de orden híbrido formados por dos tipos distintos de subunidades, cada una de las cuales exhibe un tipo diferente de ordenamiento topológico (fig.1) [14]. La introducción de dichas subunidades proporciona al sistema un parámetro de diseño adicional, que actúa como puente entre el nivel atómico característico del dominio microestructural de cada capa y el nivel mesoscópico asociado al ordenamiento de largo alcance del dispositivo completo considerado como un todo [15-17].



REFERENCIAS

1. Maciá, E. (2009) *Aperiodic Structures in Condensed Matter: Fundamentals and Applications*. CRC Press, Boca Raton, FL.
2. Maciá, E., *Rep. Prog. Phys.* **69**, 397 (2006).
3. Maciá, E., *Appl. Phys. Lett.* **73**, 3330 (1998).
4. Agarwal, V., Mora-Ramos, M. E., Alvarado-Tenorio, B., *Photon. Nanostruct.* **7**, 63 (2009).
5. Zhukovsky, S. V., Gaponenko, S. V., *Phys. Rev. E* **77**, 046602 (2008).
6. Barriuso, A. G., Monzón, J. J., Sánchez-Soto, L. L., Felipe, A., *Appl. Opt.* **46**, 2903 (2006).
7. Golmohammadi, S., Moravvej-Farshi, M. K., Rostami, A., Zarifkar, A., *Appl. Opt.* **47**, 6477 (2008).
8. Trabelsi, Y., Kanzari, M., Rezig, B., *Optica Applicata* **39**, 320 (2009).
9. Mauriz, P. W., Vasconcelos, M. S., Albuquerque, E. L., *Phys. Lett. A* **373**, 496 (2009).
10. Tuz, V. R., *J. Opt. Soc. Am. B* **26**, 627 (2009).
11. Monsoriu, J. A., Depine, R. A., Silvestre, E., *J. Eur. Opt. Soc.* **2**, 07002 (2007).
12. Monsoriu, J. A., Depine, R. A., Martínez-Ricci, M. L., Silvestre, E., Andrés, P., *Opt. Lett.* **34**, 3172 (2009).
13. Deng, X.-H., Liu, J.-T., Huang, J.-H., Zou, L., Liu, N.-H., *J. Phys.: Condens. Matt.* **22**, 055403 (2010).
14. Maciá, E., *Phys. Rev B* **63**, 205421 (2001).
15. Bouazzi, Y., Kanzari, M., *Optica Applicata* **39**, 489 (2009).
16. Chen, J., Qin, Bo., Chan, H. L. W., *Solid State Comm.* **146**, 491 (2008).
17. Nascimento, E. M., de Moura, F. A. B. F., Lyra, M. L., *Photon. Nanostruct.* **7**, 101 (2009).

Efecto de la resolución espacial en el análisis numérico de redes de difracción holográficas

J. Francés^{1*}, S. Bleda^{1,2}, S. Gallego^{1,2}, C. Neipp^{1,2}, A. Márquez^{1,2}, I. Pascual^{2,3},
A. Beléndez^{1,2}

¹Departamento de Física, Ingeniería de Sistemas y Teoría de la Señal, Universidad de Alicante; jfmonllor@ua.es.

²Instituto Universitario de Física Aplicada a las Ciencias y las Tecnologías, Universidad de Alicante.

³Departamento de Óptica, Farmacología y Anatomía, Universidad de Alicante.

Desde que en la segunda mitad del siglo XIX Maxwell publicara las leyes que rigen los fenómenos electromagnéticos, se han realizado numerosas investigaciones relacionados con la simulación del campo electromagnético y por lo tanto la resolución de dichas ecuaciones.

Los diferentes métodos que resuelven las leyes de Maxwell se diferencian entre sí por la hipótesis de partida o el tipo de simplificación analítica que delimitan su rango de aplicabilidad. En este trabajo se muestra el resultado del análisis de la resolución espacial en el método de las Diferencias Finitas en el Dominio del Tiempo¹ (DFDT) en el análisis de Redes de Difracción Holográficas (RDH). En este método el espacio de simulación se modela a partir de un medio discreto cuya unidad es lo que se conoce como la celda de Yee². Esta discretización se entiende como una aproximación del medio y por lo tanto su elección es crítica en aplicaciones nanométricas como puede ser el caso del análisis difractivo de las RDH en longitudes de onda ópticas. Concretamente, en este trabajo se van a analizar RDH en reflexión, las cuales forman la imagen difractada tal y como se ilustra en la Figura 1.

Una RDH se define como un medio cuya permitividad dieléctrica presenta una variación espacial periódica sinusoidal del tipo $\epsilon_r = \epsilon_{r,0} + \Delta\epsilon \sin(Ky)$ tal y como se ilustra en la Figura 1. El parámetro $\epsilon_{r,0}$ es la constante dieléctrica promedio, $\Delta\epsilon$ se relaciona con la modulación de la red y K es el módulo del vector de red el cual es inversamente proporcional al período de red Λ .

Existen diferentes alternativas numéricas para afrontar el análisis de de la difracción en estos tipos de dispositivos. Algunas de las técnicas aproximadas más populares es la Teoría de Ondas Acopladas (TOA) desarrollada por Kogelnik³ en 1969. La TOA asume luz monocromática incidiendo en la red de difracción y considera únicamente dos ondas significativas, la onda de referencia R y la onda de salida o S (véase Figura 1).

Posteriormente, Moharam⁴ *et al* a partir de sus trabajos en 1981 desarrollaron la popular Teoría Rigurosa de Ondas Acopladas (TROC), la cual modela de manera exhaustiva el comportamiento difractivo de estos dispositivos. Sin embargo tanto la TOC como la TROC no son aplicables en RDH de reflexión puras (franjas de interferencia paralelas al plano de incidencia). En este caso concreto, la modulación no es infinitamente periódica y las expresiones desarrolladas dejan de ser válidas ya que el teorema de Floquet deja de ser aplicable. Por ello, es necesario recurrir a otros formalismos que modelen de una manera más precisa el comportamiento de estos dispositivos.

En este trabajo se ha desarrollado un método matricial que suple estas deficiencias manipulando la ecuación diferencial de partida e identificándola con la ecuación de

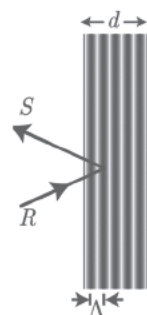


Figura 1. Esquema de una RDH.

Mathieu. La solución de esta ecuación puede definirse a partir las funciones seno $S_m(a, q, u)$ y coseno $C_m(a, q, u)$, que dependen de parámetros relacionados con las características físicas de la red. Este procedimiento permite construir una matriz que caracteriza el medio y que relaciona las componentes del campo electromagnético a los extremos de dicho medio. Este formalismo no presenta los inconvenientes mencionados por la TOC y TROC, ni tampoco el de la discretización espacial inherente al método de las DFDT.

Por otro lado, existe otra teoría similar que relaciona las componentes de los campos en los extremos de una capa homogénea dieléctrica. Este formalismo se conoce como el método de la matriz característica o por el Método del Medio Efectivo (MME). Este método al igual que el método de las DFDT necesita discretizar el medio bajo estudio y por lo tanto resulta interesante estudiar el efecto de dicha discretización en el análisis de la difracción en RDH en reflexión. En la Figura 2 se ilustra la selectividad angular de una red con parámetros $d = 11,08 \mu\text{m}$, $\Lambda = 0,22 \mu\text{m}$, $\varepsilon_0 = 1,66$, $\Delta\varepsilon = 0,082$, $\lambda = 633 \text{ nm}$. Ambas gráficas muestran las mismas curvas del análisis derivado de las funciones de Mathieu y de la TOC, mientras que en la Figura 2a se muestran las curvas obtenidas por el método de las DFDT y MME tomando cuatro puntos por período de red espacial y en la Figura 2b, ocho puntos por período.

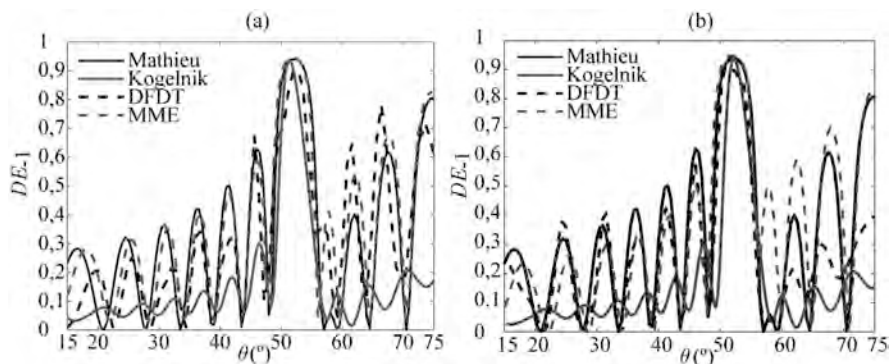


Figura 2. Selectividad angular: (a) Discretización en DFDT y ME de 4 valores por período de red. (b) Discretización en DFDT y MME de 8 valores por período de red.

La Figura 2 permite concluir que un aumento de la precisión en la discretización del patrón de interferencia en la red mejora la predicción de los métodos numéricos de las DFDT y MME, aunque tal y como se aprecia, para ángulos cercanos a Bragg, los resultados son satisfactorios en todos los casos.

Agradecimientos: Este trabajo ha sido realizado con las subvenciones del Ministerio de Ciencia e Innovación mediante los proyectos FIS2008-05856-C02-01 y FIS2008-05856-C02-02, y a través de la Generalitat Valenciana bajo el proyecto PROMETEO/2011/021.

REFERENCIAS

1. Taflov, A. (1995). Computational Electrodynamics. Artech House.
2. Yee, K. S., *IEEE Trans. Ant. And Propag.* **14**, 302-307 (1996).
3. Kogelnik, H., *Bell Syst. Tech.* **48**, 2909-2947 (1969).
4. Moharam, M. G., Gaylord, T. K., *J. Opt. Soc. Am.* **71**, 811-818 (1981).

Emisión de luz en materiales vítreos fosforescentes: comparación modelo teórico - experimento

M. J. Pérez¹, F. Moreno², J. M. Saiz² y F. González²

¹Departamento de I+D, Hispano Italiana de Revestimientos, S. A.; perezmj@hisbalit.es

²Grupo de Óptica, Departamento de Física Aplicada, Universidad de Cantabria; morenof@unican.es, saizvj@unican.es, gonzaleff@unican.es

1. Introducción

Los materiales fotoluminiscentes han mejorado sus propiedades de emisión en los últimos quince años, especialmente desde la aparición de los denominados fósforos de larga duración [1], obteniéndose productos con alto poder de emisión y largos tiempos de decaimiento. El vidrio sinterizado es un excelente soporte para dichos pigmentos, debido a sus buenas propiedades mecánicas y químicas y puede ser utilizado para el estudio del comportamiento de pigmentos fosforescentes en un medio denso.

La curva de emisión de luz debida a estos pigmentos fosforescentes no corresponde a un decaimiento puramente exponencial simple, sino que se aproxima bastante a una ley de potencias [2]. En este trabajo comparamos los resultados experimentales del decaimiento de la emisión de luz de dichos materiales vítreos fotoluminiscentes con una simulación realizada usando un modelo numérico basado en la convolución de una función estimulación y la función respuesta del material.

2. Descripción de las muestras y montaje experimental

Las muestras utilizadas en este estudio han sido elaboradas usando los medios técnicos aportados por la empresa Hispano Italiana de Revestimientos Vítreos, HISBALIT y corresponden a un mosaico comercial cuadrado de 4x4cm de la *Serie Star-Light* del catálogo [3]. La principal materia prima utilizada es vidrio molido, al que se añade un 7% de un pigmento fosforescente comercial (MHG-4B de LANXI MINHUI Photoluminescent, Co.) basado en un aluminato de alcalinotérreo dopado con iones de tierras raras. Este fósforo presenta propiedades adecuadas para soportar el proceso de fabricación del mosaico. Dicho proceso consta de las etapas de molienda, pesado, mezclado, conformado y sinterizado.

Para la iluminación de las muestras, se utiliza una lámpara de Xenon de arco corto HAMAMATSU de 150W, de alta estabilidad y larga vida, emitiendo con una distribución espectral continua y estable en el rango del UV cercano, visible e IR. Para detectar la potencia óptica emitida por las muestras se usa un detector de silicio NEWPORT, serie 818, que posee alta estabilidad y proporciona un nivel bajo de ruido, colocado a 5cm de la muestra. El final de la estimulación corresponde con el tiempo de emisión $t = 0$.

3. Resultados experimentales y simulación

En la Fig. 1 se muestra una típica representación log-log de la potencia emitida frente al tiempo de emisión desde el final de la excitación. Las curvas corresponden a una muestra excitada durante 150 y 900s, situada a 1m de la fuente, recibiendo una iluminación de 250lx.

Para simular los resultados experimentales con un modelo, hemos realizado la convolución de una función estimulación cuadrada, $E(t)$ definida en el intervalo $[-t_{\text{exc}}, 0]$, con la función respuesta de estos materiales que se aproxima a una ley de potencias del tipo $P_0(t) = P_0 \cdot t^{-\alpha}$. Obtenemos la función $P(t)$ dada por la expresión:

$$P(t) = \frac{E}{\alpha - 1} \frac{P_0}{t} \left[t^{1-\alpha} - (t + t_{\text{exc}})^{1-\alpha} \right]$$

Se observa un buen ajuste entre los valores simulados y los experimentales.

Para evaluar el ritmo de decaimiento instantáneo de la emisión, hemos definido una función $T(t)$, que representa la vida media asociada a la exponencial que podríamos ajustar en cada punto, tiempo de decaimiento dependiente del tiempo, definida como $T(t) = -[d/dt(\ln P(t))]^{-1}$. En nuestro caso, la función $T(t)$ es lineal y la pendiente resultante representa la inversa del coeficiente de la ley de potencias $T(t) = (1/\alpha) \cdot t$.

En la Fig.2 se representa esta función para los decaimientos experimentales anteriores. Se observa que la recta presenta una deformación en torno a los 20min, por lo que aparecen dos valores de α diferentes para tiempos de emisión cortos y largos, $\alpha_1 \approx 1,3$ y $\alpha_2 \approx 1,6$ [4]. Este resultado también se observa en las rectas obtenidas de la simulación.

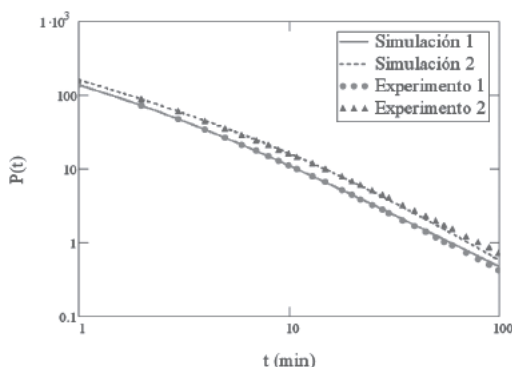


Figura 1. Resultados experimentales y simulados del decaimiento de luz de mosaico fosforescente excitado con 250lx durante 150s (1) y 900s (2).

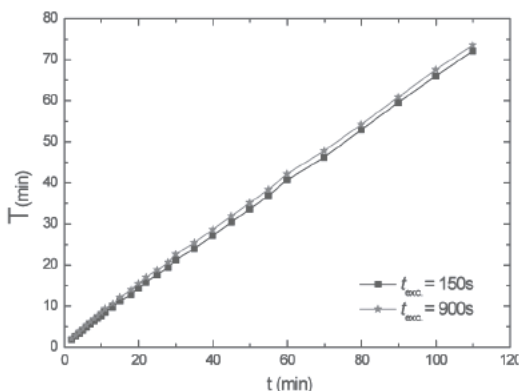


Figura 2. Vida media instantánea en función del tiempo para $E=250\text{lx}$ (datos experimento).

4. Conclusiones

El modelo teórico utilizado para simular la emisión de luz de los mosaicos fosforescentes concuerda con los datos experimentales.

REFERENCIAS

1. Matsuzawa T, Aoki Y, Takeuchi N, Murayama Y, "A New Long Phosphorescent Phosphor with High Brightness, $\text{SrAl}_2\text{O}_4:\text{Eu}^{2+}, \text{Dy}^{3+}$ ", *J. Electrochem. Soc.*, **143**, 2670 - 2673 (1996)
2. Randall JT, Wilkins MHF, "Phosphorescence and electron traps. II: The interpretation of long-period phosphorescence", *Proc. Roy. Soc. A.*, **184**, 390 - 407 (1945)
3. <http://www.hisbalit.es>
4. Pérez MJ, González I, Saiz JM, Moreno F, González F, "Saturation processes of photoluminescent pigments embedded in sinterized glass", *Journal of Modern Optics*, **56**:13, 1466 - 1474 (2009)

Estudio de las pérdidas de transmitancia por polvo acumulado en la superficie de los módulos fotovoltaicos en función del ángulo de incidencia de la radiación solar

J. Zorrilla-Casanova¹, M. Piliouguine¹, J. Carretero¹, P. Bernaola¹, P. Carpena¹, L. Mora-López²,
M. Sidrach-de-Cardona ^{*1}

^{*1} Dpto. de Física Aplicada II, Universidad de Málaga. msidrach@uma.es

² Dpto. de Lenguajes y Ciencias de la Computación, Universidad de Málaga. llanos@uma.es

La acumulación de partículas de polvo en la superficie de los módulos fotovoltaicos disminuye la radiación incidente sobre las células, bajando su rendimiento y disminuyendo la energía producida. Estudios anteriores [1] muestran que en las zonas secas, esas pérdidas pueden alcanzar el 15%. El polvo no sólo reduce la radiación incidente en la célula solar, sino que también cambia la dependencia de las pérdidas con el ángulo de incidencia de dicha radiación. Durante los últimos años, en el grupo de sistemas fotovoltaicos de la Universidad de Málaga estamos estudiando como afecta la acumulación de polvo al rendimiento de los módulos fotovoltaicos. En este trabajo presentamos los estudios teórico y experimentales realizados para explicar la dependencia de estas pérdidas con el ángulo de incidencia de la radiación solar. Con este objetivo, hemos medido la radiación recibida por dos células de silicio monocristalino que han sido previamente calibradas con un piranómetro de referencia CMP21 de Kipp and Zonen. Las dos células calibradas se colocan en un mismo plano, cuyo ángulo de inclinación es de 30 ° respecto al plano horizontal. Una de las células de referencia se ha limpiado diariamente “célula limpia”, mientras que la otra no se ha limpiado en todo el periodo de duración de las medidas “célula sucia”. Para estudiar esta dependencia comparamos los valores de irradiancia medidos con cada una de las células a lo largo de día. Las pérdidas en irradiancia se calculan como,

$$GL(\%) = 100 \times \left(\frac{G_{cc} - G_{dc}}{G_{cc}} \right)$$

donde, G_{cc} es el valor de irradiancia medido por la célula de referencia “limpia” y G_{dc} es el valor de irradiancia medido por la célula “sucia” ($W m^{-2}$). De esta forma, la comparación entre los valores registrados por las dos células nos permite cuantificar las pérdidas ocasionadas por deposición de polvo en la superficie de la célula. Estudios previos muestran que estas pérdidas dependen del ángulo de incidencia de la radiación directa [2-3].

Los resultados obtenidos muestran que cuando las dos células están limpias GL es cero a lo largo de todo el día. Cuando una célula tiene depositado polvo en su superficie, podemos distinguir dos casos: en días de cielo claro las pérdidas se hacen fuertemente dependientes del ángulo de incidencia y de la cantidad de polvo depositado. En días de cielo cubierto estas pérdidas, si bien siguen dependiendo de la cantidad de polvo depositado en la superficie de la célula, permanecen constantes a lo largo de todo el día. Los resultados experimentales se presentan en la figura 1. Esta figura muestra los valores de GL medidos en función del ángulo de incidencia para distintos niveles de suciedad. Los valores mínimos de estas pérdidas ocurren al mediodía solar, cuando el

ángulo de incidencia es mínimo. Cuando el ángulo de incidencia aumenta, las pérdidas aumentan alcanzando un valor máximo que depende también de la cantidad de polvo y sorprendentemente, disminuyen si el ángulo de incidencia sigue aumentando. Estas curvas son simétricas respecto al mediodía solar. Sin embargo, para valores altos del ángulo de incidencia se observa distinto comportamiento por la mañana y por la tarde. Esta diferencia es debida a la distinta relación entre la radiación directa y difusa a esas horas del día.

Modelado teórico de las pérdidas producidas por la suciedad

Hemos desarrollado un modelo físico simple para explicar las pérdidas de transmisión relativa debido a la presencia de polvo en superficie de la célula solar. El modelo se basa en las siguientes hipótesis:

- Los granos de polvo se modelan como esferas homogéneamente distribuidas en la superficie del panel.
- Cada esfera tiene un coeficiente de reflexión R , que comprende tanto el coeficiente para la reflexión especular como el coeficiente para la difusa.
- La radiación total incidente del Sol (I_p) se compone de radiación directa (I_o) y la radiación difusa (I_d).
- Consideramos que la radiación difusa es homogénea en cualquier dirección y se mantiene constante a lo largo del día. La radiación total recibida por la célula solar “limpia” viene dada por $G_{CC} = I_o \cos \theta + I_d$, donde θ es el ángulo de incidencia de la radiación directa sobre el plano de la célula. La componente de albedo se ha despreciado.

En la célula solar “sucía”, cualquier sombra de una esfera de polvo en el panel reduce la luz incidente. Sin embargo no toda la radiación que llega a las esferas se pierde porque una parte se refleja (factor R) y puede ser parcialmente recuperada por la célula. Ambos efectos, el sombreado y la recuperación de la luz, dependen del ángulo de incidencia de la radiación directa y por lo tanto varían a lo largo del día. Por otro lado, no hay tal dependencia en la radiación difusa ya que asumimos que I_d es constante a lo largo del día.

Hemos simulado dos supuestos: en el primero toda la radiación incidente es directa. En el segundo sobre la célula incide directa y difusa.

SIMULACIÓN CON RADIACIÓN DIRECTA

Para la radiación directa la sombra que producen las partículas de polvo aumenta con el ángulo de incidencia, alcanzando el máximo para $\theta = 90^\circ$. Al mismo tiempo, la fracción de la luz reflejada especularmente que alcanza la célula aumenta con θ hasta un valor máximo y finalmente disminuye para ángulos θ muy grandes. Por otra parte, la fracción de luz reflejada de forma difusa que alcanza la célula es constante ya que la dirección de estos rayos reflejados es independiente del ángulo de incidencia. La suma de todas estas contribuciones no es evidente y por lo tanto para simular el fenómeno hemos utilizado un trazador de rayos [4].

Para cada ángulo de incidencia trazamos 10^6 rayos que alcanzan una célula cuadrada de área unidad con una sola esfera en el centro. Imponemos condiciones de contorno periódicas. El coeficiente de reflexión de las esferas se establece en $R = 65\%$ (19,5% para reflexión especular y 45,5% para reflexión difusa). El radio de la esfera

de polvo es de $r = 0,315$ unidades, lo que equivale a una cobertura del 31,17% de la superficie de la célula. En la figura 2 se muestra el valor calculado por el modelo teórico de GL en función del ángulo de incidencia (línea discontinua). Cuando el ángulo de incidencia es pequeño el modelo teórico explica bien los resultados experimentales obtenidos, no así para ángulos de incidencia altos. En particular, mientras que el modelo teórico predice un aumento siempre creciente según del ángulo de incidencia, los resultados experimentales indican que se alcanza un valor máximo, disminuyendo después las pérdidas.

SIMULACIÓN CON RADIACIÓN DIRECTA Y DIFUSA

Como vemos, la contribución de la radiación directa por sí sola no es suficiente para explicar los resultados experimentales. Por lo tanto, incorporamos la radiación difusa del modelo. De nuevo generamos y trazamos 10^6 rayos con direcciones uniformemente distribuidas. La cantidad total de la energía transportada por estos rayos es equivalente al 23% de la radiación total que llegaría a la celda bajo incidencia normal. Cuando estos rayos se incluyen en la simulación (línea continua en la figura. 5) los resultados obtenidos para GL explican bastante bien los resultados experimentales y, en particular, reproducen la reducción de las pérdidas observadas para grandes ángulos de incidencia.

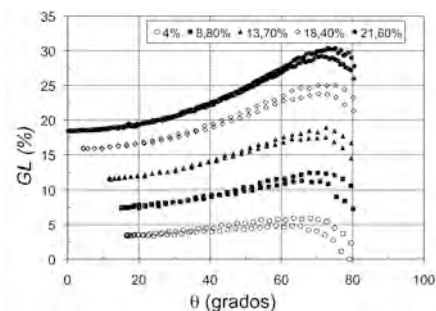


Figura 1. Dependencia de GL con el ángulo de incidencia (θ) para diferentes días con diferente cantidad de polvo depositado en la superficie.

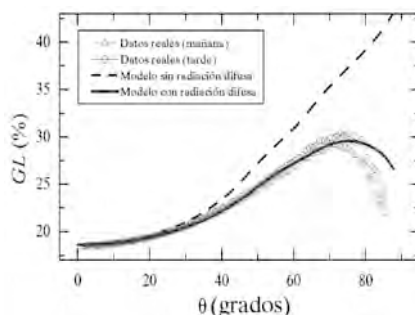


Figura 2. Pérdidas relativas de irradiancia en función del ángulo de incidencia de la irradiancia directa incidente.

REFERENCIAS

1. M. Piliougine, J. Carretero, M. Sidrach-de-Cardona, D. Montiel, P. Sánchez-Friera. Comparative analysis of the dust losses in photovoltaic modules with different cover glasses. Proceedings of 23rd European Solar Energy Conference, 2008, pp. 2698-2700.
2. D. Goossens, E. Van Kerschaever, Aeolian dust deposition on photovoltaic solar cells: the effects of wind velocity and airborne dust concentration on cell performance, Solar Energy 66 (4), 1999, pp. 277-289.
3. N. Martin, J.M. Ruiz, Calculation of the PV modules angular losses under field conditions by means of an analytical model, Solar Energy Materials & Solar Cells 70, 2001, pp. 25-38.
4. A.S. Glassner (Ed), An introduction to ray tracing, Academic Press, 1993.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo esta financiado por el M. de Ciencia y Tecnología (ENE07-67248) y por la Junta de Andalucía (P07-RNM-02504)

Estudio de los niveles de campo eléctrico de AM en un núcleo urbano

M^a M. Rufo, J. M. Paniagua, A. Jiménez, A. Antolín, F. T. Pachón

Departamento de Física Aplicada, Escuela Politécnica, Universidad de Extremadura; mmrufo@unex.es

Resumen

En los últimos años ha habido un gran incremento de la exposición a campos electromagnéticos de radiofrecuencia debido al rápido desarrollo de las nuevas tecnologías de la información y comunicación. En este trabajo hemos estudiado los niveles de exposición al campo eléctrico en la banda de AM de una pequeña población cercana a dos emplazamientos de antenas. Los emplazamientos constan de tres antenas con 95 kW de PRA¹. Todos los valores de campo eléctrico y densidad de potencia se han introducido en un SIG junto con la cartografía digital de la zona para facilitar el análisis de los resultados. Los resultados obtenidos muestran como la totalidad de los valores obtenidos están por debajo del nivel de referencia de la normativa española.

Materiales y métodos

Las medidas de campos electromagnéticos procedentes de las antenas de radiodifusión se realizaron mediante un analizador de espectros (R&S modelo FSH3) cuyo rango de frecuencia es de 100 kHz a 3 GHz con un rango dinámico -80 dBm a +20 dBm y una incertidumbre estándar en la amplitud de 0.5 dB. La antena utilizada fue una antena monopolo [ETS-LINDGREN (EMCO) modelo 3303] con un rango de frecuencia de 0.5 – 30 MHz y una incertidumbre estándar de 0.05 dB. Los espectros se colectaron ajustando el rango de frecuencia de 0.5MHz a 3.5 MHz, siendo el ancho de banda seleccionado de 10 kHz, y con la antena situada a 1.5 m del suelo sobre un trípode dieléctrico. Las medidas se registraron durante 6 minutos almacenando la traza máxima². En la figura 1 presentamos un mapa de situación de la zona objeto de estudio, junto a la cartografía digital de la población donde podemos ver los puntos de medidas seleccionados en la localidad.



Figura 1. Cartografía digital de la localidad con los puntos de medida junto al plano de situación.

Resultados

En la localidad se realizó un estudio previo para poder determinar la contribución de los diferentes rangos de frecuencias detectados. Obteniendo para la banda AM [0.5-30] MHz una contribución de 95.9% respecto al total, para la banda de TV [200-890] MHz y para la de GSM [925-960] MHz los valores fueron de 2.7 y 1.4 % respectivamente, mientras que las bandas de FM [30-200] MHz y DCS [1805-1880] fueron prácticamente despreciables.

En la tabla 1 presentamos un análisis estadístico de las tres emisiones de AM estudiadas en la localidad. En ella se presenta también la relación existente entre el valor máximo y el nivel de referencia³, donde vemos que todos los valores obtenidos en la localidad están por debajo de los límites establecidos por la legislación. Para el peor de los casos, emisión de 774 kHz, los niveles están 20 veces por debajo del límite establecido y para esta emisión se observa el mayor rango de valores, siendo mucho menor el obtenido para 900 kHz.

Frecuencia	E_{\min}	E_{\max}	E_{avg}	SD	E_{med}	E_{\max} / E_R
	V/m					
770 kHz	0.53	4.57	1.96	0.98	1.81	$5.0 \cdot 10^{-2}$
900 kHz	0.05	0.31	0.16	0.07	0.14	$3.5 \cdot 10^{-3}$
1107 kHz	0.16	2.19	0.83	0.43	0.73	$3.0 \cdot 10^{-2}$

Tabla 1. Análisis estadístico de los valores de campo eléctrico para las diferentes frecuencias en los 52 puntos medidos en la localidad de Valdesalor. E_{\min} : mínimo, E_{\max} : máximo, E_{avg} : valor medio, SD: desviación estándar, E_{med} : mediana y E_R : valor de referencia.

Los niveles de radiodifusión en onda media pueden viajar largas distancias debido a que su propagación es principalmente vía onda terrestre o ionosférica⁴. Además se puede encontrar una relación entre los niveles de campo eléctrico y la distancia al transmisor en campo abierto⁵. Sin embargo en el caso de un núcleo urbano los niveles de campo eléctrico son apantallados por los edificios y al relacionar los niveles de campo eléctrico con las distancia a los transmisores obtenemos ajustes a una función potencial con coeficientes de correlación muy poco significativos.

Agradecimientos

Agradecemos a la Junta de Extremadura (Consejería de Urbanismo y Ordenación del Territorio) la cesión de la información cartográfica.

REFERENCIAS

1. Real Decreto 765/1993, de 21 de mayo, por el que se aprueba el Plan Técnico Nacional de Radiodifusión sonora en Ondas Madias (hectométricas). BOE de 11 junio.1993.
2. Electronic Communication Committee. 2007. Measuring non-ionising electromagnetic radiation (9 kHz – 300 GHz). Revised Electronic Communication Recommendation.
3. Real Decreto 1066/2001, de 28 de septiembre, por el que se aprueba el Reglamento que establece condiciones de protección del dominio público radioeléctrico, restricciones a las emisiones radioeléctricas y medidas de protección sanitaria frente a emisiones radioeléctricas. B.O.E. nº 234 de 29 de septiembre de 2001.
4. J.S. Seybold, Introduction to RF propagation, John Wiley and Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2005.
5. Jesús M. Paniagua, Montaña Rufo, Antonio Jiménez, Alicia Antolín and Iván Pinar. Medium wave exposure characterisation using exposure quotients. Radiation Protection Dosimetry (2010), pp. 1–7.

Influencia de la trayectoria de las masas de aire en las propiedades de los aerosoles *in-situ* en una ciudad costera del Mediterráneo

A.R. Esteve¹, V. Estellés^{1,2}, S. Segura¹, M.P. Utrillas¹, J.A. Martínez-Lozano¹

¹Departament de Física de la Terra i Termodinàmica, Universitat de València; Anna.Esteve@uv.es.

²Departamento de Física Fundamental y Experimental, Electrónica y Sistemas, Universidad de La Laguna.

Una masa de aire se define como un volumen de aire cuyas propiedades físicas (principalmente, temperatura y humedad) permanecen relativamente constantes en superficies de cientos a miles de kilómetros cuadrados [1]. Aunque en esta definición no se tienen en cuenta las propiedades de las partículas suspendidas en ella, es razonable suponer que la interacción continuada entre la superficie de la región fuente y la masa de aire también determinará la naturaleza y la concentración de sus aerosoles. Esto es especialmente cierto si tenemos en cuenta que la vida media de las partículas en la troposfera es de 5 a 10 días, por lo que una masa de aire que se mantenga algunos días sobre una misma región habrá sustituido gran parte de la carga de aerosoles que poseía con anterioridad por otra. En realidad lo más probable es que las masas de aire que encontremos no sean masas puras, bien por haber sufrido mezcla homogénea o heterogénea con masas de otras características, o bien por emplear un cierto tiempo en desplazarse sobre otras regiones distintas a las de su origen.

Para analizar la relación entre el tipo de masa de aire dominante y las propiedades de los aerosoles se han calculado las retrotrayectorias de las masas de aire que en un determinado instante se encuentran sobre nuestra región con el modelo HYSPLIT (HYbrid Single-Particle Lagrangian Integrated Trajectory) [2], y estas retrotrayectorias se han clasificado de acuerdo con el modelo diseñado por Estellés y col. [3], que permite describirlas mediante unos índices básicos, y otorgar con ellos una característica primaria o secundaria a la masa de aire. Se han identificado así cinco tipos de masas de aire primarias.

Las propiedades ópticas de los aerosoles que se presentan en este trabajo fueron registradas en la estación de medida de la Facultat de Física en el Campus de Burjassot de la Universitat de València (latitud 39.507°, longitud -0.420°, 60 metros sobre el nivel del mar aproximadamente) durante el periodo 2006 – 2009 con un nefelómetro de integración TSI 3563. Este instrumento mide los coeficientes de dispersión (σ_{sp}) y retrodispersión (σ_{bsp}) de los aerosoles en 3 longitudes de onda (450, 550 y 700 nm) [4; 5], lo que nos permite calcular también el exponente de Ångström de dispersión (α_s).

En la Tabla 1 se muestra un resumen de la clasificación de las propiedades de los aerosoles medidas *in-situ* con el nefelómetro de integración TSI 3563 en función de las cinco clases básicas de masa de aire y sus clases mixtas de dos componentes. Para mejorar la concordancia temporal entre las retrotrayectorias empleadas en la clasificación de las masas de aire y las medidas *in-situ* de las propiedades de los aerosoles, se han utilizado los valores medios horarios calculados a partir de los datos registrados cada minuto entre las 12:00 y las 13:00 GMT, de forma que se minimiza el efecto de la variabilidad diaria debida a las fuentes locales.

Se comprueba que las propiedades de los aerosoles medidas *in-situ* con el nefelómetro de integración TSI 3563 son parámetros sensibles al tipo de masa de aire. Los

mayores valores de los coeficientes de dispersión y retrodispersión se obtienen bajo la influencia de masas procedentes del Norte de África y del continente europeo. Los mínimos en cambio se obtienen con las masas de aire de tipo ártico. El exponente de Ångström de dispersión presenta sus valores más altos bajo la influencia de masas de tipo europeo, cargadas principalmente con hollines de pequeño tamaño debidos a la combustión de combustibles fósiles. Los valores más bajos se obtienen con las masas de tipo polar y ártico.

	$\sigma_{sp}^{550nm} (Mm^{-1})$	$\sigma_{bsp}^{550nm} (Mm^{-1})$	a_s
AF	92 ± 9	9.9 ± 0.8	1.37 ± 0.05
AF-EU	75 ± 7	7.7 ± 0.6	1.48 ± 0.05
EU	69 ± 5	7.8 ± 0.5	1.76 ± 0.03
EU-AR	64 ± 5	7.3 ± 0.5	1.63 ± 0.04
AR	28 ± 4	3.8 ± 0.4	1.26 ± 0.05
AR-PO	44 ± 4	5.4 ± 0.4	1.36 ± 0.04
PO	61 ± 5	6.8 ± 0.5	1.50 ± 0.04
PO-TR	60 ± 7	7.1 ± 0.7	1.40 ± 0.07
TR	78 ± 14	9 ± 1	1.56 ± 0.07
TR-AF	100 ± 18	10 ± 2	1.49 ± 0.07

Tabla 1. Promedio y error estándar de los coeficientes de dispersión y retrodispersión a 550 nm y del exponente de Ångström de dispersión en función de la masa de aire dominante (Tipo de masa de aire AF: Africana; EU: Europea; AR: Ártica; PO: Polar; TR: Tropical).

Agradecimientos: Este trabajo ha sido financiando por el Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN) a través del proyecto CGL2009-07790 y por la Generalitat Valenciana a través del proyecto PROMETEO-2010-064. La colaboración de S. Segura y V. Estellés fue posible gracias a las becas BES-2010-031626 y JCI-2009-04455, respectivamente.

REFERENCIAS

1. Barry, R.G. y Chorley, R.J. (1987). *Atmósfera, tiempo y clima*. Ediciones Omega, Barcelona, España.
2. <http://www.arl.noaa.gov/ready/hysplit4.html>
3. Estellés, V., Martínez-Lozano, J.A. y Utrillas, M.P., *Journal of Geophysical Research*, **112**, D15211 (2007).
4. Anderson, T.L., Covert, D.S., Marshall, S.F., Laucks, M.L., Charlson, R.J., Waggoner, A.P., Ogren, J.A., Caldow, R., Holm, R.L., Quant, F.R., Sem, G.J., Wiedensohler, A., Ahlquist, N.A. y Bates, T.S., *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, **13**, 967-986 (1996).
5. Heintzenberg, J. y Charlson, R.J., *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, **13**, 987-1000 (1996).

Intercambio neto de dióxido de carbono en un ecosistema rural

V. Paredes, I.A. Pérez, M.A. García y M.L. Sánchez

Departamento de Física Aplicada, Facultad de Ciencias, Universidad de Valladolid; vparedes@fa1.uva.es

Introducción

El cambio climático es uno de los principales retos ambientales a los que se enfrenta la sociedad actual. Su principal causa es el incremento de emisiones de gases de efecto invernadero a la atmósfera, en especial el dióxido de carbono, CO_2 . Con el Protocolo de Kioto, los países firmantes se comprometieron a reducir las emisiones a nivel global al menos un 5% respecto a los niveles de 1990 en el período 2008-2012. La cuantificación del intercambio neto de CO_2 entre la vegetación y la atmósfera se considerada requisito esencial para entender el papel de la biosfera en el cambio climático y un instrumento para garantizar el cumplimiento de los objetivos del Protocolo de Kioto. Este intercambio neto de CO_2 del ecosistema (NEE) depende de varios factores ambientales y su estimación permite saber si el ecosistema ejerce de sumidero o fuente de CO_2 . En este trabajo se presentan los resultados de la estimación del intercambio neto de CO_2 , mediante la técnica *eddy covariance*, en un ecosistema rural agrícola para tres años de medida.

Descripción experimental y resultados

Los flujos de CO_2 se midieron en el Centro de Investigación de la Baja Atmósfera, CIBA (lat: 41°49'N, long: 4°56', alt: 845 m), a 30 km al noroeste de Valladolid en un área rural agrícola no influenciada por emisiones antropogénicas y de características semiáridas. Se determinaron mediante el método de *eddy covariance* utilizando un analizador de infrarrojos de respuesta rápida, LI-7500, y un anemómetro sónico, CSAT3, que operan a una frecuencia de 10 Hz y están ubicados a 2.5 m de altura. A partir de esos datos, se estimó la cantidad total de NEE para distintas escalas temporales. También se midieron otras variables meteorológicas convencionales. Los datos obtenidos abarcaron 3 años con condiciones climatológicas diferentes, desde marzo de 2007 hasta julio de 2009, centrando nuestro interés en los 3 periodos de crecimiento vegetativo (de marzo a julio), cuando la actividad fotosintética es más activa. Los datos se registraron en un datalogger (CR23X, *Campbell Scientific*) y se procesaron mediante el software TK2 [1] para obtener valores medios semihorarios. Además de las correcciones y controles de calidad llevadas a cabo por este software, también se analizó el balance del cierre de energía, obteniéndose un desajuste del 10%, dentro del rango aceptado. Como filtro para los flujos nocturnos en condiciones de baja turbulencia se ha usado el umbral de la velocidad de fricción, $u^* < 0.1$ m/s. Como método de rellenado de los huecos de datos, se ha aplicado la función hiperbólica de respuesta de la luz de Michaelis-Menten para los datos diurnos [2] y una ecuación paramétrica exponencial en función de la temperatura del aire y de la fracción evaporativa para los datos nocturnos.

Como resultado, los flujos de CO_2 siguieron la evolución mensual esperada según el periodo de crecimiento vegetativo dado en latitudes medias y altas del hemisferio norte. La asimilación neta de CO_2 comienza en marzo, aumenta hasta llegar a un máxi-

mo entre mayo y junio, y posteriormente experimenta un rápido descenso coincidiendo con el comienzo de la senescencia de la vegetación del lugar (Figura 1). A partir de agosto, el ecosistema actúa de fuente de CO_2 , presentando la máxima tasa neta de respiración en el mes de octubre, debido a las suaves temperaturas y a una mayor actividad microbiológica del suelo tras el periodo de lluvias comunes en esa época. El valor promedio total durante el primer año completo de medidas fue $-0.50 \mu\text{mol}/\text{m}^2\text{s}$, mostrando una prevalencia del secuestro de carbono frente a la respiración.

El flujo diario neto de CO_2 varió a lo largo de la campaña de medidas desde 2.05 a $-5.25 \text{ gC}/\text{m}^2\text{día}$ el 3 de octubre y 14 de mayo de 2007, respectivamente. La figura 2 muestra la variación diaria de los datos durante cada uno de los 3 periodos de máximo interés (PMI) explicada en gran parte por la radiación fotosintéticamente activa (PAR), $r^2=0.85$. De media, la franja horaria en la que el ecosistema actúa de sumidero es de 6:00 a 18:00 (GMT) durante el PMI. La suma anual de NEE en el primer año completo de medidas fue $-189.7 \text{ gC}/\text{m}^2\text{año}$, valor semejante a los descritos en bibliografía [3], mientras que la suma de NEE obtenida para cada uno de los PMI fue -243.8 , -183.3 y $-137.9 \text{ gC}/\text{m}^2$ para el 2007, 2008 y 2009, respectivamente. Cabe destacar la influencia de la sequía acontecida en el 2009, registrándose temperaturas más cálidas y una precipitación acumulada de 375.3 mm , muy inferior a la de los dos años anteriores, ligeramente húmedos, y la media histórica, 486 , 496.7 y 445.7 mm , respectivamente. Esto evidencia la sensibilidad de un ecosistema semiárido, a episodios de sequía y su influencia en el transporte neto de CO_2 desde la atmósfera a la biosfera.

Agradecimientos: Este trabajo ha sido cofinanciado por el Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN) y fondos FEDER.

REFERENCIAS

1. Mauder, M., Foken, T. (2004) Documentation and Instruction Manual of the Eddy Covariance Software Package TK2. Universität Bayreuth. 45pp.
2. alge, E., Baldocchi, D. et al., *Agricultural and Forest Meteorology*, **107**, 43-69 (2001)
3. Nagy, Z., Pintér, K. et al., *Agriculture, Ecosystems & Environment*, **121**, 21-29 (2007)

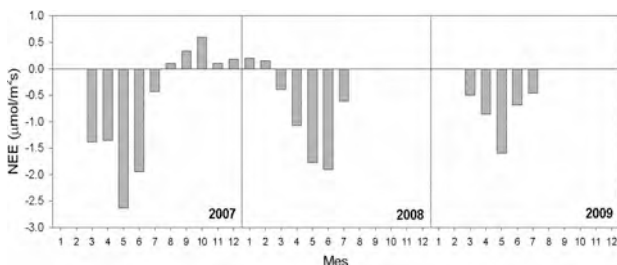


Figura 1. Variación estacional de NEE durante el periodo de medidas.

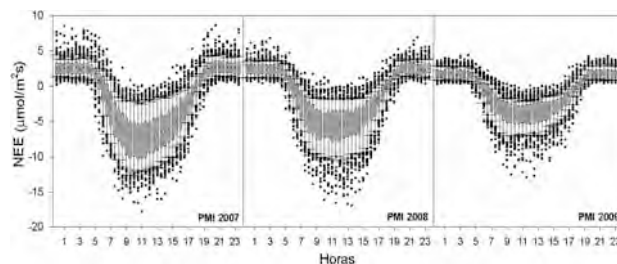


Figura 2. Ciclo diario de los datos semihorarios de flujo de CO_2 durante los PMIs de los años 2007, 2008 y 2009.

La Capa de Inversión en la Tropopausa Dinámica y la Tropopausa Térmica

G. Sáenz¹, T. Birner² y J. A. García¹

¹Departamento de Física, Universidad de Extremadura; guadalupesaenz@unex.es.

²Department of Atmospheric Science, Universidad Estatal de Colorado; thomas@atmos.colostate.edu.

La tropopausa es un elemento climático importante, se ha sugerido como indicador del cambio climático [1]. La comprensión detallada del gradiente térmico vertical atmosférico y por tanto de la estratificación alrededor de la tropopausa será crucial para el entendimiento de la tropopausa en sí misma, de la distribución de gases traza como el ozono y el vapor de agua y del sistema climático global.

A partir de datos de radiosondeo de alta resolución se observó la existencia de una capa de inversión alrededor de la tropopausa, denominada “Tropopause Inversion Layer (TIL)” [2]. El gradiente vertical de temperatura exhibía una fuerte inversión alrededor de la tropopausa. Correspondiendo a un máximo de la frecuencia de Brunt Väisälä (N^2), un máximo de estabilidad dentro de la TIL, cuyos valores eran mayores que los considerados estratosféricos. Aunque la causa de la TIL es aún desconocida, se cree que su estudio tendrá importantes implicaciones dinámicas en el transporte de gases traza en esta región de la atmósfera.

En este trabajo se pretende estudiar si la existencia y el comportamiento de la TIL es independiente o no de la definición de la tropopausa utilizada, dinámica o térmica. Para ello se han usado los datos del reanálisis ERA-Interim proporcionados por el Centro Europeo de Predicción Meteorológica (The European Centre for Medium-Range Weather Forecasts, ECMWF) en el periodo comprendido entre (1989-2009). Desde un punto de vista térmico la tropopausa ha sido calculada según la definición de la Organización Meteorológica Mundial[3]: la tropopausa térmica corresponde al nivel más bajo para el cual el gradiente térmico disminuye a $2\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{km}$, y el gradiente térmico medio entre ese nivel y los superiores en los siguientes 2 km no supera los $2\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{km}$, utilizándose el algoritmo de Reichler[4]. Para la identificación de la tropopausa dinámica se escogió el primer nivel donde la vorticidad potencial isentrópica supera el umbral de 3.5 PVU (Unidades de vorticidad potencial, $1\text{ PVU}=1.0 \times 10^{-6}\text{ Km}^2\text{kg}^{-1}\text{s}^{-1}$), escogiéndose este valor como el valor óptimo en latitudes extratropicales según estudios anteriores [5,6].

Para preservar la variación temporal y espacial de la tropopausa se utilizó como coordenada vertical la altura respecto al valor medio de la tropopausa (z_{mod}) en lugar de la altura respecto al nivel del mar, utilizada convencionalmente [2,7]. Para un periodo determinado, por ejemplo un mes, y para cada punto de red, se calculó la tropopausa media ($z_{\text{Tp}}(\text{media})$). Fijado un Δz de altura respecto de la tropopausa media, se calculó el valor medio de cada variable meteorológica (T , N^2) en el intervalo temporal considerado y en el nivel $z_{\text{Tp}}(\text{instantáneo})+\Delta z$. Al valor medio así obtenido se le asignó el valor de altura $z_{\text{Tp}}(\text{media})+\Delta z$.

A partir del perfil térmico y el perfil del parámetro de estabilidad N^2 , calculados con respecto a la altura de la tropopausa, se observó la existencia de la capa de inversión (TIL) tanto para la tropopausa térmica como para la tropopausa dinámica.

Al estudiar la estructura latitudinal del parámetro de estabilidad en la TIL (Figura 1), respecto a la altura de la tropopausa térmica y dinámica, se mostró que la capa de inversión (TIL) está presente en todas las estaciones del año desde subtrópicos al polo,

con un valor y comportamiento estacional similar independientemente de la definición de la tropopausa, térmica o dinámica.

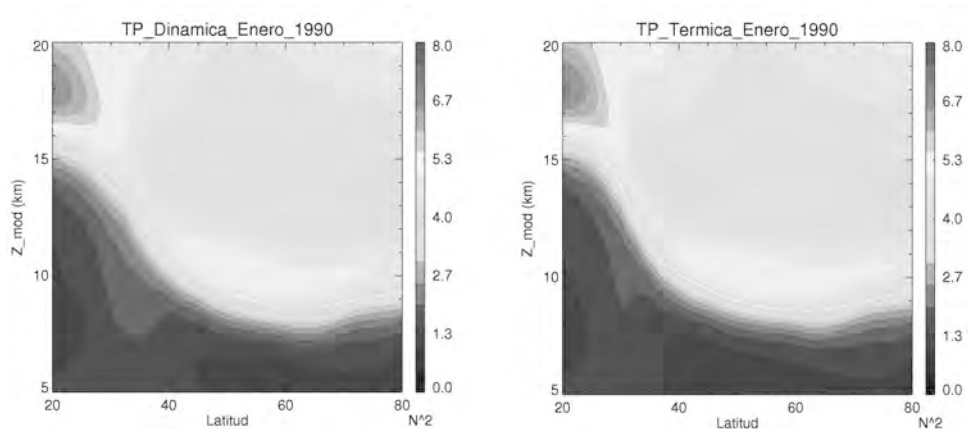


Figura 1. Parámetro de estabilidad N^2 con respecto a la latitud y la altura de la tropopausa dinámica (a la izquierda) y térmica (a la derecha). Valores de $N^2 \times 10^{-4} \text{ s}^{-2}$.

Agradecimientos al Ministerio de Ciencia e Innovación por la financiación del proyecto de investigación CGL2007-65891-C05-05/CLI, a la Junta de Extremadura, al Fondo Social Europeo y al Fondo Europeo de Desarrollo Regional.

REFERENCIAS

1. Santer B. D., Sausen, R., Wigley T.M.L., Boyle, J.S., AchutaRao, K., Doutriaux, C., Hansen, J.E., Meehl, G.A., Roeckner, E., Ruedy, R., Schmidt, G. y Taylor, K.E., Journal of Geophysical Research, vol. 108, doi:10.1029/2002JD002258(2003).
2. Birner, T., Dömbrock, A. y Schumann U., Geophysical Research Letters, vol. 29, no. 14, 1700, 10.1029/2002GL015142(2002).
3. WMO, Meteorology- A three-dimensional science, WMO Bull, 6, (Oct), 134-138(1957).
4. Reichler, T., Dameris, M., Sausen Ro, Geophysical Research Letters, 30, doi:10.1029/2003GL018240(2003).
5. Hoerling M.P., Shaack, T. K. y Lenzen, A.J., Monthly Weather Review, vol. 119, 1816-1831(1991).
6. García-Chamorro, M., Saenz, G., Barriopedro, D., Añel, J.A., Fortuny, D., Bladé I., European Geosciences Union General Assembly, 2010.
7. Birner, T., Journal of Geophysical Research, vo. 111, D04104, doi:10.1029/2005JD006301(2006).

Localización del centelleo producido por el descenso repentino de TEC en la ionosfera

I. Rodríguez-Bilbao¹, G. Rodríguez-Caderot², B. Moreno³, M. Herraiz^{1,4},
R. Ezquer⁵

¹Departamento de Física de la Tierra, Astronomía y Astrofísica I, Facultad de CC. Físicas, Universidad Complutense de Madrid, 28040, Madrid; izarrobi@gmail.com; mherraiz@fis.ucm.es.

²Sección Departamental de Astronomía y Geodesia, Facultad de Matemáticas, Universidad Complutense de Madrid, 28040, Madrid; grc@mat.ucm.es.

³Global Geomonitoring and Gravity Field, Deutsches GeoForschungZentrum (GFZ), Münchner Straße 20, 82234 Weßling, Germany; moreno@gfz-potsdam.de.

⁴Instituto de Geociencias (UCM-CSIC), Madrid.

⁵Universidad Tecnológica Nacional. Facultad Regional de Tucumán, CIASUR, Argentina.

La ionosfera a bajas latitudes, y sobre todo en épocas de gran actividad solar y durante las primeras horas nocturnas, sufre repentinas variaciones en la densidad del plasma que pueden afectar a la señal emitida por los satélites GNSS y degradar la precisión y fiabilidad de las técnicas de posicionamiento. A las fluctuaciones de las señales que son producidas por las irregularidades de densidad electrónica de la ionosfera se las denomina centelleo (Ezquer et al., 2008). Su estudio es importante debido a que pueden reducir la amplitud de la señal por debajo del nivel de detección de ésta.

El propósito del estudio es ver qué tipo de relación se produce entre las burbujas de plasma en la ionosfera (EPBs), caracterizadas por un fuerte descenso momentáneo del contenido total de electrones (TEC), y el centelleo de las señales procedentes de los satélites GPS que atraviesan dichas burbujas.

En este estudio se analizan ficheros RINEX correspondientes a receptores GPS de doble frecuencia (L1 y L2), junto con datos de centelleo de amplitud de la señal (sobre la portadora L1) y valores del índice S4 proporcionados por la Universidad Tecnológica Nacional de Tucumán, correspondientes al año 2001 que fue de especial actividad solar. La estación permanente de Tucumán (26° 49' S, 65° 11' W) está situada bajo el pico sur de la Anomalía Ecuatorial (AE), a -15° de latitud geomagnética. Mediante un software desarrollado entre la Universidad Complutense de Madrid y la Universidad de Jaén, (de Lacy et al. 2008) se han procesado los archivos en formato RINEX junto con diversos productos precisos, sobre las órbitas y relojes de los satélites, que ofrece el IGS (*International GPS Service*). De este modo se han obtenido: el contenido oblicuo de electrones (sTEC) para cada arco satélite-receptor y el contenido electrónico vertical (vTEC), el ROT (*Rate Of change of TEC*) y el ROTI (*Rate Of TEC Index*, basado en la desviación estándar del ROT) referidos al IPP (*Ionospheric Piercing Point*), (Moreno et al., 2010) para los mismos días en los que tenemos datos de centelleo. Al final solo se han seleccionado los casos en los que aparecen burbujas y centelleo simultáneamente.

Los parámetros obtenidos a partir de los datos GPS sirven para identificar las burbujas y cuantificar el grado de variación que sufre el TEC en un periodo de tiempo determinado, mientras que el centelleo nos da el grado de alteración de la señal recibida en la estación. El índice S4 es un indicador de la desviación estándar de la potencia de la señal recibida y refleja la variación en la amplitud de la señal registrada en el receptor.

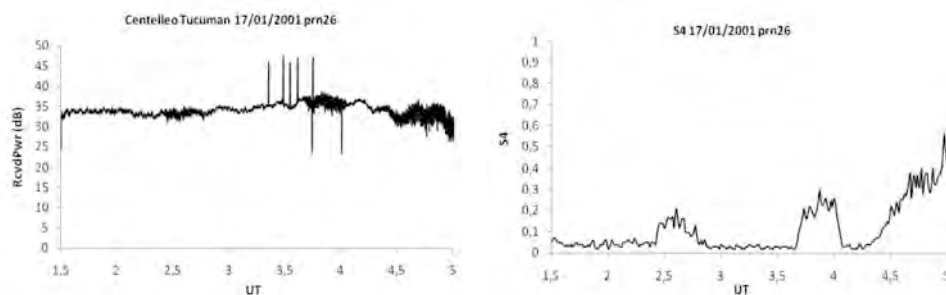


Figura 1. Variación temporal del centelleo y del índice S4 (en horas de Tiempo Universal) del 17 de Enero del 2001 para el satélite GPS PRN 26. LT=UT-4h.

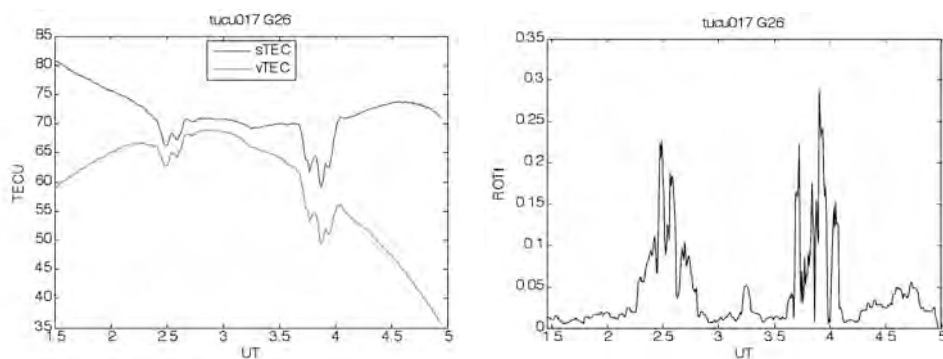


Figura 2. sTEC, vTEC y ROTI (en horas de Tiempo Universal) del 17 de Enero del 2001 para el satélite GPS PRN 26. LT=UT-4h.

Al representar gráficamente el S4 (calculado a partir de las señales de centelleo) (Figura 1) y el ROTI (obtenido a partir del TEC) (Figura 2) las burbujas aparecen representadas como incrementos y aunque en el índice S4 hay otros factores, como el multi-trayecto, que producen fuertes variaciones de amplitud, la localización temporal de las burbujas puede identificarse claramente. De este modo se puede detectar el centelleo achacable a las burbujas y a partir de aquí analizar sus características (fluctuaciones de baja frecuencia y gran amplitud). La representación de la trayectoria del satélite, a partir de su elevación y acimut, realizada mediante un diagrama de cielo centrado en la estación receptora permite, además, ver de forma aproximada donde se encuentra el satélite en el momento en el que atraviesa estas irregularidades de TEC.

REFERENCIAS

1. Ezquer, R. G., Radicella, S. M., *Física de la Tierra*, **20**, 61-81 (2008).
2. de Lacy, M.C, Gil, A.J., Rodríguez-Caderot, G, Moreno, B., *Física de la Tierra*, **20**, 133-150 (2008).
3. Moreno, B., Radicella, S., de Lacy, M.C., Herraiz, M., Rodríguez-Caderot, G., *GPS Solutions*, doi: 10.1007/s10291-010-0197-1 (2010).

Patrones de flujo en un cilindro en rotación

R. Chicharro¹, A. Vázquez²

Laboratorio de Fluidos, Departamento de Física, Facultad de Ciencias, UNAM

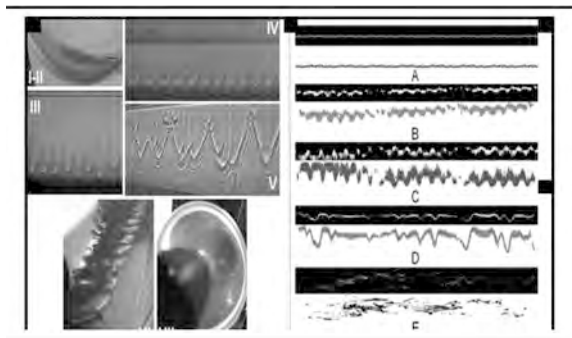
¹ rocio.chicharro@ciencias.unam.mx

² zeta24_75@yahoo.com

La evolución de una capa fina de líquido, sobre o dentro de un cilindro circular recto que está sometido a rotación sobre un eje horizontal se llama rimming flow. Es importante no sólo observar (información cualitativa) el rimming flow, sino que es necesario obtener una caracterización cuantitativa del fenómeno, en este sentido, el objetivo del presente estudio es la determinación experimental de las transiciones que tienen lugar para una fracción de llenado baja y con una velocidad de rotación del cilindro (Ω) en un intervalo entre 0.05 a 5.2 s^{-1} , usando un análisis de series de tiempo por medio de las herramientas de sistemas dinámicos (mapas de recurrencia y la dimensión de correlación).

El sistema experimental consiste en un cilindro de plexiglás horizontal con un radio de 4.7 cm y una longitud de 67 cm . Su rotación se realiza con un servomotor controlado por una PC. Se llena con agua destilada con una fracción de 1.8% (70.7 ml). Para visualizar los patrones se tiene una bombilla incandescente de 300 W que se encuentra a una distancia de 80 cm del cilindro. En tanto para obtener las series de tiempo, se utilizó la proyección de un plano de luz láser de 532 nm a 500 mW , el cual se dirige a la parte frontal a lo largo del cilindro y es recogida en una pantalla blanca no reflejante, donde se observa la proyección en dos dimensiones del patrón de flujo. Los patrones fueron grabados con una cámara de alta velocidad a 500 cuadros por segundo con una resolución de 800×600 en 8 bits.

En la figura 1a, se muestran los patrones observados: I piscina ($\Omega=0$), II básico, III dedos, IV canales, V cascadas, VI dientes suaves y VII anular. Las fotografías III-V, se adquieren por la proyección de la luz incandescente y las otras son tomadas directamente del cilindro. En la figura 1b, corresponde a las series de tiempo correspondientes a los patrones II-VI; cada serie está compuesta por mas de 30000 datos.



Figuras: 1a, Patrones de flujo. 1b, Series de tiempo para cada patrón.

En la figura 2a, se muestran los resultados para los mapas de recurrencia. Se puede observar que en el patrón de piscina todos los puntos caen sobre la diagonal. Indicando que el patrón es muy estable, debido a que el cilindro está en reposo y la luz laser no se dispersa. Los patrones de dedos y canales tienen un comportamiento similar en su estructura, pues muchos puntos se encuentran sobre la diagonal. Para el patrón de cascada se observa una estructura diferente con un comportamiento aleatorio sobre la diagonal. En el mapa de recurrencia para el patrón de dientes suaves

ves. Se observa un comportamiento totalmente caótico ya que todos los puntos están dispersos y no es posible ver una estructura. La figura 2, muestra los resultados para la dimensión de correlación (D_2). Es evidente que en el patrón de la piscina de series de tiempo es una línea horizontal y que una dimensión es suficiente para cubrir o integrar el patrón. Al aumentar la dimensión de correlación de 1.08 a 2.26 indica que el patrón de los dedos es inestable con respecto al patrón de la piscina, y se observa que los puntos se alejan de la diagonal en el mapa de recurrencia. Cuando D_2 va de 2.26 a 2.42 este aumento indica que el patrón de surcos es un poco más complejo o al azar que el patrón de los dedos, lo cual es corroborado por los mapas de recurrencia, en los que es posible ver que en el patrón, el recubrimiento líquido pasa de estable a estados inestables. Posteriormente D_2 cae de 2.42 a 2.15 teniendo que el patrón de cascadas es más estable que el de canales, pero esta situación no es observada en el mapa de recurrencia, esto debido a que el mapa de recurrencia para las cascadas indica una distribución de puntos más dispersa, aunque todavía es posible observar algún tipo de estructura. Finalmente D_2 alcanza un valor máximo en 5.2, lo cual indica que el patrón de dientes alisados es el más inestable o caótico, dicho comportamiento es corroborado por su mapa de recurrencia, en donde casi todos los puntos están alejados de la diagonal.



Figura 2a, Mapas de recurrencia

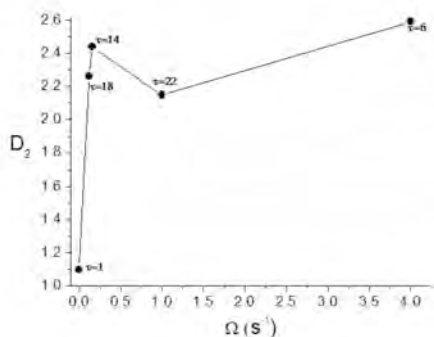


Figura 2b, Dimensión de correlación

Placas zonales basadas en la secuencia de Thue-Morse

A. Calatayud^{1*}, L. Remón¹, C. Casanova², F. Giménez³, W.D. Furlan² y J.A. Monsoriu¹

1. Centro de Tecnologías Físicas, Universitat Politècnica de València, Camino de Vera s/n, 46022 Valencia.

2. Departamento de Óptica, Universitat de València, Dr. Moliner 50, 46100 Burjassot (Valencia).

3. Instituto Universitario de Matemática Pura y Aplicada, Universitat Politècnica de València, Camino de Vera s/n, 46022 Valencia.

*email: arcalata@upvnet.upv.es

1. Introducción

En las últimas décadas se ha experimentado un creciente interés en el estudio de las propiedades de focalización de lentes difractivas conocidas como placas zonales (PZs). En este contexto nuestro grupo de investigación ha estado trabajando en los últimos años en la realización de nuevos diseños de PZs basados en secuencias aperiódicas [1], donde la característica más importante de estas nuevas PZs es su carácter multifocal. En esta contribución presentamos una nueva familia de placas zonales basadas en la secuencia aperiódica denominada Thue-Morse [2]. Se analizan y discuten las propiedades de focalización de este nuevo tipo de lente.

2. Diseño de placas Thue-Morse

Una placa zonal de Fresnel consiste en un conjunto de zonas anulares opacas y transparentes cuyos radios son proporcionales a la raíz cuadrada de los números naturales y donde cada par de zonas constituye un periodo, siendo el área de cada periodo constante en toda la PZ. Sustituyendo la secuencia periódica anterior por una secuencia Thue-Morse se obtiene la placa zonal Thue-Morse (PZTM). La generación de dicha secuencia a partir del orden más bajo, $S_0=A$, se obtiene reemplazando A y B por $A \rightarrow AB$ y $B \rightarrow BA$, donde A representa zonas transparentes y B zonas opacas. Así el primer orden sería $S_1=AB$ y los siguientes $S_2=ABBA$, $S_3=ABBABAAB$, $S_4=ABBABAABBABBA...$. En la figura 1 se muestra una PZTM $S=6$ (Fig. 1b) y su correspondiente PZ de Fresnel (Fig. 1a).

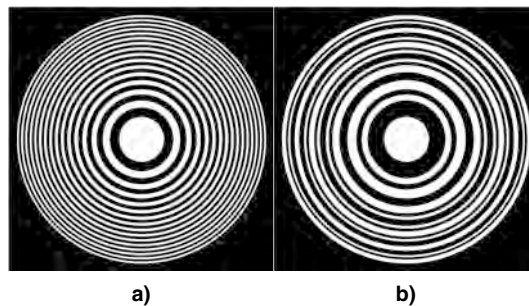


Figura 1. a) PZ de Fresnel b) y su correspondiente PZTM.

3. Propiedades de focalización

Utilizando la teoría de la difracción, dentro de la aproximación de Fresnel, la irradiancia axial producida por una placa zonal cuando es iluminada por una onda monocromática plana puede ser expresada como la transformada de Fourier:

$$I(u) = 4\pi^2 u^2 \left| \int_{-0.5}^{0.5} q(\xi) \exp(-i2\pi u \xi) d\xi \right|^2,$$

donde $u=a^2/(2\lambda z)$ es la coordenada axial normalizada, a es el radio máximo de la lente, λ es la longitud de onda, z es la distancia medida desde el plano de la pupila, $q(\xi)$ es la transmitancia de la lente expresada en función de la coordenada radial cuadrática normalizada $\xi=(r/a)^2$. En la Figura 2 se muestra la irradiancia axial normalizada para una PZ de Fresnel y su correspondiente PZTM para diferentes ordenes $S=5, 6$ y 7 .

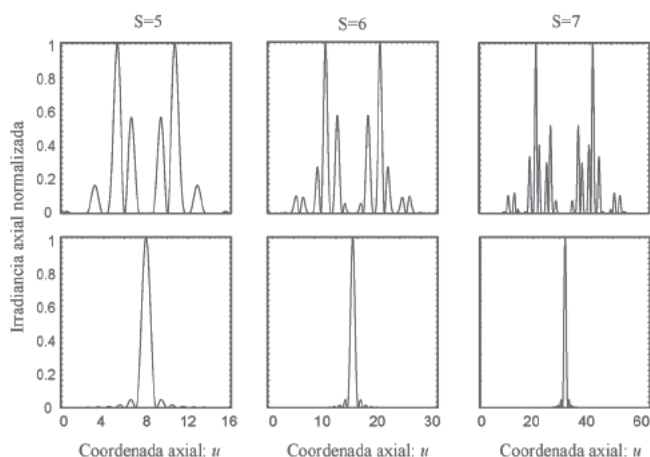


Figura 2. Irradiancia axial normalizada de una PZTM (arriba) para ordenes $S=5, 6$ y 7 y su correspondiente PZ de Fresnel (abajo).

Se pone de manifiesto que las PZTMs presentan un comportamiento bifocal, donde cada uno de los focos es autosimilar, es decir, la irradiancia para los órdenes inferiores forma la envolvente de los órdenes superiores. Esta característica bifocal y autosimilar mejora las prestaciones de la PZ frente a las lentes difractivas convencionales en sistemas de formación de imágenes, reduciendo además la aberración cromática y aumentando la profundidad de cada uno de los focos.

REFERENCIAS

- [1] W.D. Furlan, G. Saavedra, and J.A. Monsoriu "Fractal zone plates", Opt. Letters 12, 971-973 (2003).
- [2] E. Maciá, "The role of aperiodic order in science and technology", Rep. Prog. Phys. 69, 397-441 (2006).

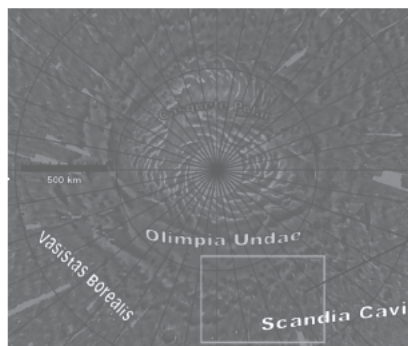
Posibles estructuras volcánicas cerca de Olympia Undae, Polo Norte de Marte

M. Sánchez-Bayton^{*1}, E. Tréguier², M. Herraiz^{1,3}, P. Martín²

¹Departamento de Geofísica y Meteorología, Facultad de Ciencias Físicas, UCM; Madrid, España, ²European Space Astronomy Center, Villanueva de la Cañada, España, ³Instituto de Geociencias (UCM-CSIC) *mbayton@esac.esa.int

1. Introducción

Aunque el volcanismo en Marte comenzó a disminuir significativamente hace mucho tiempo [1] (al menos desde el Amazónico temprano, unos ~2 Gy), datos orbitales recientes sugieren una actividad volcánica localizada, relativamente reciente (hasta < 100 My en la región de Tharsis) y episódica, en algunos lugares de la superficie de Marte [2,3,4,5]. Algunos de esos lugares están localizados en la zona periférica al Polo Norte [5]. Este trabajo realiza un estudio sobre estructuras encontradas en esa zona, cerca del mar de dunas Olympia Undae, una zona de afloramiento de volcanes jóvenes, domos, cráteres de impacto, etc. Muchos de estos accidentes son especialmente complicados de diferenciar, debido a su tamaño al recubrimiento de los cráteres por sedimentos. Para este estudio se han empleado fundamentalmente datos proporcionados por las sondas Mars Express (imágenes HRSC), y Mars Global Surveyor (imágenes MOC y datos altimétricos MOLA).



1. Fig. 1 Mapa general del Polo Norte (THEMIS)



2. Fig. 2. Detalle de la zona donde se encontraron las estructuras de la tabla.

○ Domos
○ Posibles Volcanes

2. Identificación de estructuras.

Localizadas en la frontera entre Olympia Undae y Scandia Cavi se estudian fundamentalmente:

- Domos de posible origen volcánico, ninguno presenta cráter pero si puntos máximos de acumulación de materia. (Do3 y Do6: fig.2, tabla 1) todos, situados en Olympia Undae, presentan estructuras semejantes, así como una asimetría en su forma.
- Posibles volcanes (presentan cráter) situados justo en la frontera de Olympia Undae con Scandia Cavi (fig. 2, Vp1 y Vo2 Tabla1)



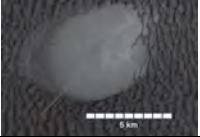
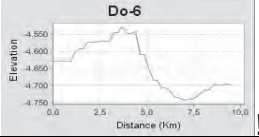
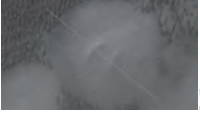
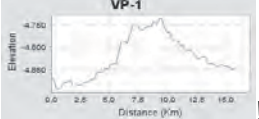

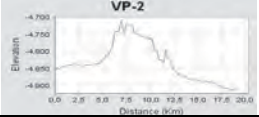
	Imagen y perfil	Perfil	Localización
Do3			Perímetro: 18,4 km, Área: 25,13 km ² , Ancho: 5,75 km, Longitud: 5,26 km. Elevación: 150 m, Hundimiento: 140 m. Altura máxima -4360 m. Mínima -4650m.
Do6			Perímetro: 23 km, Área: 32 km ² , Ancho: 7,29 km, Longitud: 5,65 km. Altura máxima -4545 m. Mínima -4733.
VP1			Perímetro: 25,3km, Área: 52,8km ² , Radio: 4-4.2 km (casi circular). Altura máxima: -4720m.
VP2			Perímetro: 43,43 km, Área: 141,02 km ² , Ancho: 12,8 km, Longitud: 13,1 km. Altura máxima -4740 m.

Tabla 1. Do3 y 6: Domos. Imágenes correspondientes: H5848_0000_ND3, H5794_0000_ND3. Los Domos están situados entre 180°-200°E y 78-80°N. VP1 y VP2: Posibles volcanes. Imágenes correspondientes H5855_0000_ND3 y H5796_0000_ND3. Los volcanes se encuentran entre 207°-208° y 78°-79°N. Los perfiles se representan sobre imágenes HRSC, altimetría MOLA.

3. Discusión

Las fuertes similitudes y la proximidad geográfica de los edificios hacen pensar en un mismo fenómeno geológico causante de la formación. Aunque a primera vista su forma sugiere un origen volcánico, otras estructuras de diferente naturaleza (domos, “pingos”, etc.) pueden, a menudo, confundirse con estructuras volcánicas.

En Olympia Undae, unidad geológica situada justo al Sur de esas estructuras, se han detectado depósitos de yeso [6]. Aunque se han presentado varias hipótesis sobre la posible causa de la presencia de estos yesos, su origen es todavía incierto, pudiendo ser causado por procesos volcánicos (e.g. hidrotermales), lo que concordaría con la presencia de edificios volcánicos en las proximidades.

Debido a la orientación similar de las estructuras encontradas en este estudio (Fig 2: redondel rojo, tabla 1: Do 3 y 6), una explicación eólica parecería la más probable: parece que vientos catabáticos también soplan en las zonas polares de Marte [7]

REFERENCIAS

[1] Carr & Head (2009), EPSL, vol. 294. [2] Neukum et al. (2004), Nature, vol. 432. [3] Vaucher et al. (2008), Icarus, vol. 200. [4] Mangold et al. (2010), EPSL, vol. 294. [5] Neukum & van Gasselt (2006), EPSC, p.621. [6] Langevin et al. (2005), Science, vol. 307.. [7]. Howard (2000), Icarus, vol. 144.

Propiedades polarimétricas de la luz difundida por nanopartículas

Braulio García-Cámara, Francisco González, Fernando Moreno

Grupo de Óptica, Departamento de Física Aplicada, Universidad de Cantabria; garciacb@unican.es.

Introducción

En los últimos años se ha intensificado la investigación sobre la preparación, caracterización y manipulación de nanopartículas magnéticas dado su interés en diversos campos, como el almacenamiento de información [1] o tratamientos terapéuticos [2]. Al mismo tiempo, han surgido los nuevos materiales ingenierizados, más conocidos como metamateriales. La estructura interna de estos medios, formada por los “meta-átomos” y cuyo tamaño es mucho menor que la longitud de onda de la radiación incidente, confiere a esos medios unas propiedades ópticas “macroscópicas” efectivas [3]. La manipulación de la composición, densidad, tamaño y forma del “meta-átomo” permite controlar esas propiedades “macroscópicas”, obteniendo incluso permeabilidades magnéticas distintas de 1 en el rango del visible [4].

Las propiedades magnéticas de nanopartículas o nanoestructuras en general (los “meta-átomos” en el visible), se manifiestan en el espectro de la luz difundida por las mismas. En particular, en este trabajo presentamos la sensibilidad que el grado de polarización lineal del campo electromagnético difundido a $\theta_{sca}=90^\circ$ [5] tiene a los comportamientos magnéticos de nanopartículas. El estudio se presenta para nanopartículas tanto ideales (ϵ , μ arbitrarios) como reales.

Grado de Polarización Lineal (P_L)

Este parámetro polarimétrico viene definido por [6]

$$P_L(\theta_{sca}) = \frac{I_{\perp}(\theta_{sca}) - I_{\parallel}(\theta_{sca})}{I_{\perp}(\theta_{sca}) + I_{\parallel}(\theta_{sca})} \quad (1)$$

siendo I_{\perp} e I_{\parallel} las componentes linealmente polarizadas de la intensidad difundida, perpendicular y paralela al plano de difusión respectivamente, medidas para un ángulo de difusión θ_{sca} .

A través de un análisis detallado de la expresión (1) se demuestra que para nanopartículas (donde el carácter dipolar es dominante) los valores positivos de $P_L(90^\circ)$ están asociados a comportamientos eléctricos del difusor, mientras que cuando $P_L(90^\circ)$ es negativo el difusor presenta un comportamiento de carácter magnético.

Resultados

Hemos considerado dos tipos de partículas, ambas de tamaño nanométrico. La primera es una esfera de tamaño $R=100 \text{ nm}$ con unas constantes ópticas (ϵ , μ) ideales y cuyas partes reales presentan una evolución espectral como la mostrada en la Fig. 1a [7]. Esta relación de dispersión hace que la luz difundida por esta partícula presente comportamientos dipolares eléctricos (asociados al coeficiente de Mie a_1) o magnéticos (asociados al coeficiente de Mie b_1) respectivamente tal y como se ve en Fig. 1c donde se representa el espectro de la eficiencia de extinción (Q_{ext}). El segundo tipo

de difusor consiste en una partícula esférica de silicio y tamaño $R=230\text{nm}$. El Silicio, aunque dieléctrico (Fig. 1b), presenta en el infrarrojo cercano un espectro de Q_{ext} donde aparecen claramente tanto comportamientos eléctricos como magnéticos (Fig. 1d).

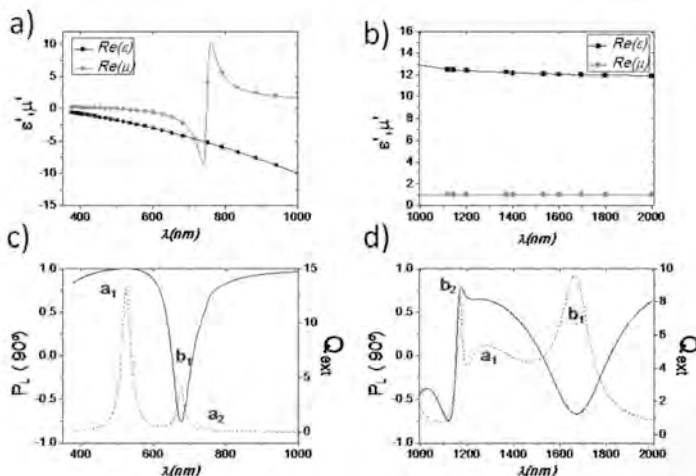


Fig. 1. (a) Parte real de las constantes ópticas de una partícula ideal siguiendo el modelo descrito en [7] y (b) de una partícula de silicio. (c) Evolución espectral de $P_L(90^\circ)$ para la partícula idealizada de (a) y (d) de silicio. Comparativamente se han incluido las evoluciones espectrales, Q_{ext} , identificando las resonancias con los coeficientes de Mie que adquieren valores máximos en cada una de ellas y que determinan su carácter eléctrico (a_1 , a_2) o magnético (b_1 , b_2).

En las Figs. 1c y 1d, se observa como $P_L(90^\circ)$ sigue el comportamiento del espectro, tomando valores positivos cuando el carácter dominante es eléctrico, mientras que es negativo si el comportamiento más destacado es magnético. Esto es válido tanto para partículas ideales donde estos comportamientos vienen dados por las constantes ópticas (Fig. 1a), como para partículas reales y dieléctricas en este caso (Si) (Fig. 1b) donde el comportamiento magnético es el resultado de una acción conjunta de las constantes ópticas, el tamaño y la forma del difusor.

REFERENCIAS

1. Chappert C., Fert A. and Van Dau F.N., *Nature Mat.* **6**, 813-823 (2007).
2. Bardhan R. et al., *Adv. Funt. Mat.* **19**, 3901-3909 (2009).
3. Zheludev N.I., *Science* **328**, 582-583 (2010).
4. Shalaev V.M., *Nature Phot.* **1**, 41-48 (2007).
5. Setien B., Albella P., Saiz J.M., González F. and Moreno F., *New J. Phys.*, **12**, 103031 (2010).
6. Bohren C.F. and Huffman D.R. (1983), *Absorption and Scattering Light by Small Particles*. Wiley&Sons.
7. Ruppin R., *Solid State Commun.* **116**, 411-415 (2000).

Segmentación de imágenes cenitales de gotas sésiles para el estudio de la mojabilidad de superficies de titanio

Juan F. Gómez Lopera¹, José Martínez Aroza², Miguel A. Rodríguez Valverde³, Miguel Cabrerizo Vélchez⁴, Javier Montes Ruiz-Cabello⁵, Miguel A. Fernández Rodríguez⁶

¹Departamento de Física Aplicada, Universidad de Granada; jfgomez@ugr.es.

²Departamento Matemática Aplicada, Universidad de Granada; jmaroza@ugr.es.

³Departamento de Física Aplicada, Universidad de Granada; marodri@ugr.es.

⁴Departamento de Física Aplicada, Universidad de Granada; mcabre@ugr.es.

⁵Departamento de Física Aplicada, Universidad de Granada; fjmontes@ugr.es.

⁶Departamento de Física Aplicada, Universidad de Granada; mafernandez@ugr.es.

Introducción

En este trabajo se presenta un método de segmentación entrópica de imágenes cenitales de gotas sésiles para el estudio de la mojabilidad de superficies de titanio. En implantología, el titanio es un material biocompatible sobre el que la osteointegración depende de eventos biológicos precursores como la adsorción de proteínas del fluido corporal en el que se encuentra inmerso el implante. Dicha adsorción depende a su vez, entre otras variables, de la mojabilidad de la superficie de titanio, es decir, del grado de extensión de un líquido sobre la superficie sólida.

Las dificultades principales al analizar vistas cenitales de gotas sésiles son: A) las diferencias de contraste y aparición de sombras debido al tipo de iluminación, y B) las texturas de la superficie. No existe una solución universal robusta para este problema. Se suelen proponer estrategias ad-hoc que usualmente requieren una alta interacción con el usuario [1]. Aquí se propone un método semi-automático más versátil y aplicable a diferentes casos que disminuye la intervención del usuario.

Segmentación entrópica de imágenes mediante crecimiento y fusión de regiones

El método de segmentación propuesto se basa en la divergencia de Jensen-Shannon (JS) entre histogramas de niveles de gris normalizados. Es una medida inversa de la cohesión entre dos distribuciones probabilidades P_1, P_2 con el mismo espacio muestral, definida como $JS(P_1, P_2) = H(P_1 + P_2/2) - (H(P_1) + H(P_2))/2$, siendo $H(\cdot)$ la entropía de Shannon. El método asigna a cada píxel de la imagen el valor de JS estimado a partir de los valores de las divergencias entre los histogramas normalizados de las dos partes de una ventana deslizante circular orientada en cuatro direcciones (0° , 45° , 90° y 135°) ([2], [3]). Valores de JS altos indican que el píxel tiene alta probabilidad de ser borde, y bajos una alta probabilidad de ser un punto interior de una región. Considerando la matriz de JSs como una superficie tridimensional discreta, cada píxel P_{ij} de la matriz tiene asociada una terna (i, j, JS_{ij}) . La segunda etapa es en un proceso similar a una inundación: A) inundación progresiva de la matriz de JSs desde 0 hasta inundación completa; B) fusión de regiones, uniéndolas iterativamente las dos regiones adyacentes de menor divergencia entre sus histogramas y de menor divergencia media de los píxeles a lo largo de su borde común [3].

Preparación de las muestras de titanio y estudio de la mojabilidad

Se han preparado muestras de titanio comercialmente puro (Grado II, ASTM) sometiéndolas a lavados, en ultrasonidos, de acetona, agua, jabón, aclarados con etanol y agua MilliQ, para eliminar los residuos tras el proceso de pulido. A continuación las muestras se sometieron a los siguientes procesos: 1) baño ultrasónico de acetona durante 45 minutos; 2) exposición a un plasma de argón (25 W) durante 15 minutos (con el que se volatilizan los compuestos orgánicos y se hidrofaliza la superficie); 3) oxidación en agua durante 24 horas (con lo que se crea una capa de óxido que mejora la biocompatibilidad); 4) calentamiento a 180°C durante 30 minutos (con lo que se elimina el agua adsorbida sobre la superficie). Seguidamente se depositaron gotas de agua MilliQ sobre los discos de titanio en un ambiente controlado y se tomaron imágenes cenitales con una cámara Pixelink A741. A continuación se procesaron las imágenes mediante segmentación utilizando la técnica descrita en la sección 2, con la que se obtuvo el contorno y el área mojada por la gota. El área sólido-líquido (A_{SL}) normalizada por el cuadrado de la raíz cúbica del volumen ($V^{2/3}$) de la gota proporcionó información indirecta del ángulo de contacto a partir de la relación $A_{SL}/V^{2/3} = f(\theta, V^{1/3}/l_0)$ donde θ es el ángulo de contacto de una gota ideal axisimétrica y l_0 es la longitud de capilaridad [4].

Resultados

El método descrito se ha aplicado a la imagen cenital de una gota de agua sobre una superficie de titanio altamente hidrófila de la Figura 1. En este caso, el valor del área mojada normalizada fue 24.1, lo que confirma la elevada mojabilidad del sustrato comparada con el valor del área sobre el titanio sin ser sometido al tratamiento hidrofílico en el que se obtuvo 4.2. La técnica propuesta se ha aplicado con éxito a imágenes con problemas de contraste, iluminación y textura de vistas cenitales de gotas sésiles para estudio de la mojabilidad del titanio.

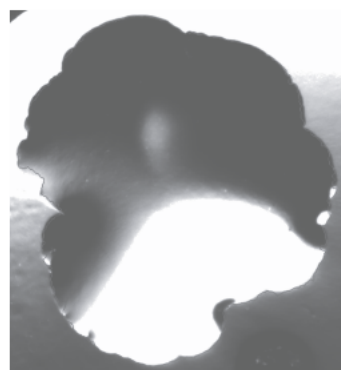


Figura 1. Imagen segmentada de una gota de agua sobre titanio.

REFERENCIAS

1. Alvarez, J.M. et al., *Colloids and Surfaces A*, 156-163 (1999).
2. Gómez-Lopera J.F. et al., *Journal of Mathematical Imaging and Vision* 13(1), 35-56 (2000).
3. Gomez-Lopera, J.F. et al. *Int. Work. on Local and Non-Local Approx. in Image Proc.*, 98 (2009).
4. Neumann, A.W. *Applied surface Thermodynamics*, 2nd Edition. CRC Press. 744.

Simulación y análisis de componentes integrados plasmónicos no lineales

José R. Salgueiro¹, Carlos Pérez¹

¹Departamento de Física Aplicada, Universidad de Vigo; jrs@uvigo.es

Se presentan algunas ideas para la implementación del método de diferencias finitas en el dominio temporal (FDTD) para simular estructuras integradas compuestas por metales y por dieléctricos no lineales. Estas estructuras son de gran interés dado que la incorporación de metales permite la confinación de luz en dimensiones nanométricas, lo que redundaría en la posibilidad de conseguir una mayor encapsulación de los dispositivos. Por otra parte, los efectos no lineales permiten la utilización de la propia luz para el control y configuración de los dispositivos, permitiendo la posibilidad de generar componentes activos que son el fundamento de los dispositivos totalmente ópticos. Se presenta como caso particular un análisis de un acoplador direccional que permite conmutación totalmente óptica controlada por la potencia del haz incidente.

1. Simulación de componentes plasmónicos

Los dispositivos integrados que contienen metales funcionan por la excitación de plasmones superficiales[1], que son estados resonantes de la luz con las oscilaciones de plasma de los electrones libres. La posibilidad (y conveniencia) de diseñar estructuras para propagar luz confinada en una distancia mucho menor que su longitud de onda tiene como contrapartida la imposibilidad de utilizar los métodos tradicionales basados en el método de propagación de haces (BPM). El método FDTD aborda de forma directa las ecuaciones de Maxwell y no sólo hace posible la simulación, sino que también permite la simulación de las pérdidas de propagación características de los metales a frecuencias ópticas dado a que a tales frecuencias los metales no pueden considerarse metales perfectos.

La simulación FDTD incluye tres aspectos esenciales. Uno es el algoritmo en sí, que es un método explícito (leap-frog) que aborda las ecuaciones de Maxwell en forma de diferencias finitas en el espacio y el tiempo, y que requiere de un modelo adecuado que describa las ecuaciones materiales del medio ($\vec{D} = \epsilon_0 \epsilon \vec{E}$ y $\vec{B} = \mu \vec{H}$). Por otra parte, requiere de unas condiciones de contorno absorbentes que eviten la entrada de radiación reflejada desde los bordes del dominio de cálculo. La implementación más moderna la constituye las condiciones que tratan el absorbente como un medio uniaxial con impedancia ajustada (UPML). Finalmente requiere del diseño de las fuentes el campo que introduzcan la radiación en el dominio de cálculo de la forma apropiada.

La simulación de estructuras metálicas tiene su complejidad. El uso de simplemente una permitividad eléctrica compleja no conduce a una descripción satisfactoria y a un algoritmo que funcione. En efecto, los metales son materiales fuertemente dispersivos y por lo tanto es necesario utilizar algún modelo basado por ejemplo en una ecuación diferencial auxiliar que modele el comportamiento temporal de la polarización electrónica. En el caso presente se ha abordado por medio de un término de corriente de polarización $\vec{J} = \partial_t \vec{P}$, que se introduce como fuente de corriente en la ley de Ampère $\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}$, y que se modela dentro del algoritmo por medio de la ecuación: $\partial_t \vec{J} + \Gamma \vec{J} = \epsilon_0 \omega_p^2 \vec{E}$, siendo ω_p la frecuencia de plasma y Γ la frecuencia de colisión elec-

trónica (descriptora de las pérdidas) [2]. Para simular el medio no lineal, no obstante, se usa un modelo simple de respuesta instantánea del medio (apropiado para haces continuos) usando la ecuación material $\vec{D} = \epsilon(|E|^2)\vec{E}$ [3].

2. Análisis de un acoplador direccional

Mediante el método FDTD se ha simulado un acoplador direccional formado por dos guías con núcleo dieléctrico no lineal cubiertas metálicas[4]. Cuando las pérdidas no se tienen en cuenta es posible obtener la curva de conmutación característica de los acopladores no lineales (figura 1), con la ventaja de resultar un dispositivo que presenta unas decenas de nanómetros de anchura. En la misma figura 1 puede verse que la conmutación es todavía posible cuando se tienen en cuenta las pérdidas, aunque se produce una disminución efectiva de la potencia de luz.

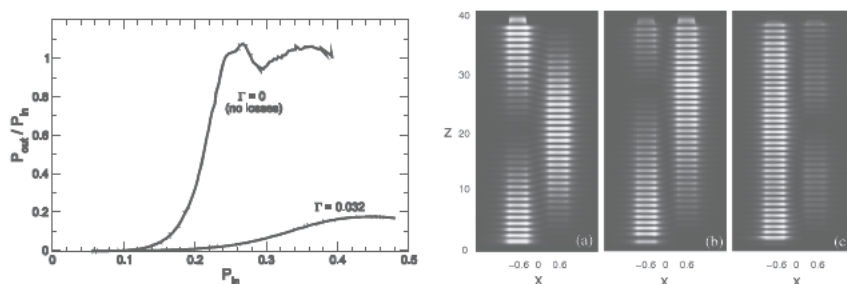


Figura 1. Izquierda: curva de conmutación que representa la fracción de potencia de salida en la guía que se excita en función de la potencia de entrada, para una longitud correspondiente a una distancia de acoplamiento lineal. Se muestra la curva para el caso sin pérdidas y con pérdidas realistas. Derecha: simulación FDTD del acoplador plasmónico no lineal. Las tres viñetas corresponden a los casos de potencia baja, media y alta.

Agradecimientos: Este trabajo ha sido financiado por el Ministerio de Ciencia e Innovación (MAT2008-06870) y la Xunta de Galicia (10PXIB265118PR).

REFERENCIAS

1. Maier, S. A. (2007). *Plasmonics: Fundamentals and Applications*. Springer.
2. Cumber, S. A., *IEEE Trans Antennas Propagat.*, **45**, 392 – 400 (1997)
3. Joseph, R. M., Allen, T., *IEEE Phot. Tech. Lett.*, **6**, 1251 – 1254, (1994)
4. Salgueiro, J. R., Kivshar, Yu. S., *Appl. Phys. Lett.*, **97**, 081106 (2010).

Sintonización plasmónica mediante interacción de nanopartículas con sustratos multicapa.

P. Albella¹, Silvia M. Del Río², F. González², J.M. Saiz² and F. Moreno²

¹ Centro de Física de Materiales CSIC-UPV/EHU and DIPC, Paseo Manuel Lardizabal 4, San Sebastian 20018, España; email: pablo_albella@ehu.es

² Grupo de Óptica, Departamento de Física Aplicada, Universidad de Cantabria.

Introducción

Los fenómenos ópticos a escala menor que la longitud de onda de la luz, están ganando importancia en diferentes campos, y más concretamente en Nanotecnología [1]. Durante las dos últimas décadas, la investigación entorno a nanopartículas metálicas (NPs) interaccionando con sustratos, ha presentado gran interés. Éste, ha surgido en parte por la necesidad de la industria tecnológica por inspeccionar, monitorizar, caracterizar materiales, detectar partículas contaminantes, rugosidades y otros defectos en rangos menores que la longitud de onda. Hasta ahora, la mayor parte de los estudios realizados, se han centrado en la influencia que tiene un sustrato homogéneo sobre las resonancias plasmónicas excitadas en la nanopartícula metálica [2]. El trabajo que presentamos, tiene como principal objetivo profundizar en el estudio de la interacción de nanopartículas metálicas con sustratos, con el fin de encontrar un método novedoso de sintonización de resonancias plasmónicas [3]. En esta contribución, extendemos el estudio a sistemas donde la nanopartícula metálica interactúa con sustratos de dos capas. Mostraremos que el uso de este tipo de sustratos puede resultar útil en la sintonización de la respuesta óptica de la nanopartícula.

Resultados y discusión

Cuando una partícula metálica se coloca cerca de un sustrato, las resonancias plasmónicas localizadas (LSPR) excitadas en la nanopartícula se ven afectadas por la interacción de la NP con el sustrato. Esta interacción no solo depende de las propiedades geométricas del sistema (forma de la NP y de la distancia al sustrato) sino también de las propiedades ópticas del sustrato. Como ejemplo de los resultados obtenidos en este estudio, mostramos la Fig. 1 donde se observa como influye la presencia del sustrato multicapa en la posición de las resonancias plasmónicas al variar el espesor (Fig1a) y las propiedades ópticas (Fig.1b) de las capas del sustrato.

En el estudio que hemos realizado, se ha empleado una nanopartícula cúbica metálica colocada a una distancia de 2 nm sobre un sustrato de dos capas con distintos espesores y propiedades ópticas. El sistema se ha iluminado en incidencia normal, con una onda electromagnética plana linealmente polarizada, con campo eléctrico paralelo al plano de incidencia. El método de cálculo utilizado ha sido DDA (Aproximación de Dipolo Discreto)[4].

Del estudio realizado se observa que al aumentar el espesor de la capa superior del sustrato, h_2 , manteniendo fijos el índice de refracción de ambas capas, $m_2 = 1.3$ y $m_3 = 2$, y el espesor de la capa inferior, $h_3 = 8\text{nm}$, la resonancia plasmónica dipolar se desplaza hacia el azul y hay una disminución de la interacción entre la NP y el sustrato. Esto es debido a que la capa inferior es la que tiene mayor índice de refracción y por tanto mayor protagonismo en dicha interacción. Al aumentar el espesor de la capa superior, es

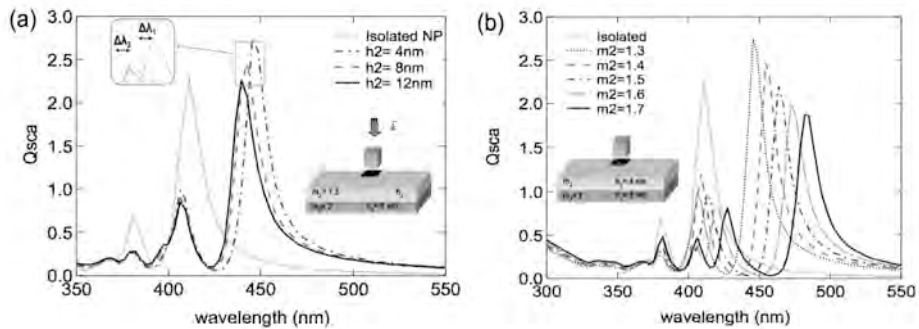


Figura 1. Eficiencia de scattering de una nanopartícula cúbica de plata de 40 nm situada a 2 nm de un sustrato bicapa, (a) variando su espesor y (b) propiedades ópticas

como si alejáramos la NP de esta capa, y por tanto disminuye la interacción de ésta con la NP. También se observa que al aumentar el índice de refracción de la capa superior del sustrato, m_2 , manteniendo fijos el resto de parámetros, $m_3 = 2$, $h_2 = 4\text{ nm}$ y $h_3 = 8\text{ nm}$, la resonancia dipolar, se desplaza hacia el rojo al mismo tiempo que se observan nuevos modos de orden superior a longitudes de onda más cercanas al azul.

Otro efecto importante que se observa en este estudio, es que la resonancia plasmónica dipolar es más sensible que la cuadrupolar al variar las propiedades ópticas de la capa inferior del sustrato.

Conclusiones

Como conclusión general, este estudio nos indica que es posible la sintonización de resonancias plasmónicas mediante sustratos con más de una capa, creados a partir de una selección de materiales con índices de refracción y espesores adecuados.

REFERENCIAS

- [1] Ekmel Ozbay, Science **189**, 311 (2006).
- [2] P. Albella, F. Moreno, J. M. Saiz and F. González. Opt. Express **16**, 12872 (2008).
- [3] F. Moreno, F. González and J. M. Saiz, Opt. Letters **31**, 1902 (2006).
- [4] Draine, B. T. And Flatau, P. J. (2004), <http://arxiv.org/abs/astro-ph/0409262v2>

Soluciones analíticas aproximadas para una familia de osciladores no lineales conservativos

L. Hurtado¹, A. Márquez^{1,2}, E. Arribas³, I. Pascual^{2,4}, A. Beléndez^{1,2}

¹Departamento de Física, Ingeniería de Sistemas y Teoría de la Señal, Universidad de Alicante; a.belendez@ua.es.

²Instituto Universitario de Física Aplicada a las Ciencias y las Tecnologías, Universidad de Alicante.

³Departamento de Física Aplicada, Escuela Superior de Ingeniería Informática de Albacete, Universidad de Castilla-La Mancha.

⁴Departamento de Óptica, Farmacología y Anatomía, Universidad de Alicante.

El estudio de los osciladores no lineales es uno de los temas clásicos de la mecánica y la necesidad de disponer de soluciones analíticas ha dado lugar al desarrollo de numerosos métodos aproximados [1, 2]. En este trabajo se analiza una familia de osciladores no lineales unidimensionales conservativos gobernados por la siguiente ecuación diferencial adimensional de segundo orden [3]

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \operatorname{sgn}(x)|x|^\alpha = 0, \quad \alpha \geq 0 \quad (1)$$

con las condiciones iniciales

$$x(0) = A \quad \left(\frac{dx}{dt} \right)_{t=0} = 0 \quad (2)$$

siendo A la amplitud de las oscilaciones y $\operatorname{sgn}(x)$ la función signo. La familia de osciladores conservativos descritos por las ecuaciones (1) y (2) tienen la particularidad de que su frecuencia exacta tiene expresión analítica y su valor es [3]

$$\omega_e(A, \alpha) = \sqrt{\frac{\pi(\alpha+1)}{2}} \Gamma\left(\frac{\alpha+3}{2(\alpha+1)}\right) \Gamma^{-1}\left(\frac{1}{\alpha+1}\right) A^{(\alpha-1)/2} \quad (3)$$

donde Γ es la función gamma. El procedimiento utilizado para obtener una solución analítica aproximada para la ecuación (1), con las condiciones iniciales de la ecuación (2), consiste en aplicar el método del balance armónico racional a la ecuación (1). Para ello se utiliza como solución analítica aproximada la siguiente expresión [4]

$$x(\tau) = \frac{(1-r)^2 A \cos \tau}{1+r^2-2r \cos 2\tau}, \quad \tau = \omega t \quad (4)$$

donde $-1 < r < 1$. Esta ecuación presenta la ventaja de que su desarrollo en serie de Fourier tiene una expresión sencilla y fácil de manipular

$$x(\tau) = A(1-r) \sum_{n=1}^{\infty} r^n \cos[(2n+1)\tau] \quad (5)$$

Para aplicar el método de balance armónico se sustituye (4) en (1), se desarrolla el resultado en serie de Fourier y se hacen cero los coeficientes de los dos primeros armónicos, lo que permite obtener un valor aproximado para la frecuencia ω y el valor del parámetro r . Sin embargo, puesto que la familia de osciladores considerada se caracteriza por tener una expresión analítica para la frecuencia exacta, se propone utilizar esta expresión exacta para ω , por lo que sólo es necesario anular el coeficiente

del primer armónico al tener únicamente como incógnita el parámetro r . Esto implica, además, que la solución analítica aproximada propuesta se caracteriza por tener un valor exacto para la frecuencia. Procediendo de esta manera se obtiene finalmente la siguiente ecuación

$$\frac{\pi}{2}(\alpha+1)(1-r)\Gamma^2\left(\frac{\alpha+3}{2(\alpha+1)}\right) + \left(\frac{1-r}{1+r}\right)^{2\alpha} \Gamma^2\left(\frac{1}{\alpha+1}\right) \frac{\alpha\Gamma(\alpha/2)}{\sqrt{\pi}\Gamma((\alpha+3)/2)^2} F_1\left(\alpha, 1+\frac{\alpha}{2}; \frac{\alpha}{2}+\frac{3}{2}; -\frac{4r}{(1+r)^2}\right) = 0 \quad (6)$$

En el caso más general, para resolver la ecuación no lineal (6) es necesario hacer uso de métodos aproximados y en este trabajo se ha utilizado el método de Newton-Raphson. Sin embargo, para ciertos valores del parámetro α es posible encontrar una solución exacta para r , ya que en estas situaciones la función hipergeométrica ${}_2F_1(\dots)$ se simplifica. Una vez determinados los valores de r para cada valor de α considerado, se han comparado las soluciones exacta (obtenida resolviendo numéricamente la ecuación (1)) y aproximada (ecuación (4)), ambas normalizadas a la unidad (x/A), y se ha obtenido la diferencia entre las dos, así como el valor absoluto máximo de esta diferencia, designado por Δ . En la Tabla 1 se muestran los resultados obtenidos para algunos de los osciladores analizados. Como puede verse existe un acuerdo aceptable entre los resultados exactos obtenidos numéricamente y los aproximados, con lo que se valida la propuesta realizada en este trabajo.

α	r	Δ
0	-0.0320491	0.014
1/3	-0.02	0.008
4/3	0.0086454	0.0022
2	0.024227	0.0034
3	0.0449029	0.00025
5	0.081508	0.018

Tabla 1. Resultados para algunos de los osciladores no lineales analizados.

Este trabajo ha sido financiado por el Vicerrectorado de Tecnología e Innovación Educativa de la Universidad de Alicante (GITE-09006-UA). Parte de este trabajo corresponde al PFC de uno de los autores (L. Hurtado).

REFERENCIAS

1. Nayfeh, A. H., Mook, D. T. (1979). *Nonlinear oscillations*. Wiley-Interscience.
2. Mickens, R. E. (1996). *Oscillations in Planar Dynamics Systems*. World Scientific. Págs. 149–151.
3. Kovacic, I., *Commun. Nonlinear Sci. and Num. Simulat.*, **15**, 2651–2658 (2010).
4. Yamgoué, S. B., Bogning, J. R., Jiotso, A. K., Kofané, T. C., *Phys. Scr.*, **81**, 035003 (2010).

Validación del método para extraer la solución del suelo por centrifugación con rotor de ángulo fijo

J.C. Lozano¹, C. Prieto¹, P. Blanco Rodríguez², F. Vera Tomé³, R. Maldonado Pérez¹

¹Departamento de Física Fundamental, Universidad de Salamanca; jll390@usal.es.

²Departamento de Física, Universidad de Extremadura; pbr@unex.es.

³Departamento de Física Aplicada, Universidad de Extremadura; fvt@unex.es.

Una tarea fundamental en el estudio de la transferencia de elementos desde el suelo a las plantas es la obtención de la disolución del suelo. Sin embargo, los métodos propuestos son operacionalmente definidos, por lo que los resultados de los análisis dependen en gran medida del método utilizado.

Uno de los métodos más extendidos para obtener la solución del suelo consiste en extraer, mediante centrifugación, una porción de dicha solución. La principal ventaja de este método es la reproducibilidad y rapidez en la obtención de los resultados [1]. Sin embargo, en este método la estructura del suelo puede modificarse, integrándose en la fracción extraída agua ligada al suelo con tensiones muy distintas, y por tanto, los elementos presentes podrían corresponderse con equilibrios agua-suelo obtenidos en condiciones diversas.

Uno de los objetivos del presente estudio consiste en reproducir, mediante centrifugación, las curvas características de varios suelos utilizando métodos estándares, como es la cámara de presión de Richards [2]. Sin embargo, el uso de rotores de ángulo fijo, que utiliza esta técnica, plantea un serio inconveniente para reproducir dichas curvas, debido a motivos puramente geométricos. Estos defectos geométricos requieren correcciones de difícil aplicación a muestras sólidas, como es el caso de un suelo húmedo.

Dado que no existen portamuestras accesibles comercialmente adaptados a los rotores de ángulo fijo, la propuesta de una modificación sobre la disposición de la muestra (Fig.1) y su validación es el objetivo principal de este estudio. La disposición que proponemos debe considerar un nivel constante del agua extraída que garantice la condición de saturación en la fracción de suelo, de tal forma que se cumpla la premisa de tensión matricial nula en la cara posterior (la más alejada del eje de rotación). En estas condiciones se podrá asumir continuidad en el flujo del fluido a lo largo del volumen del suelo [3], tanto en condiciones de saturación completa como en condiciones de no saturación inicial. En el primero de estos dos casos, mediante el control de la velocidad angular del rotor, es factible aplicar una fuerza equivalente a la que se deriva de aplicar una presión definida en la cámara de presión de Richards, y por tanto conseguir, dentro de los errores experimentales, la misma curva característica del suelo.

Realizado el calibrado en condiciones de saturación de la muestra, proponemos el análisis en condiciones de no saturación inicial del suelo mediante una secuencia

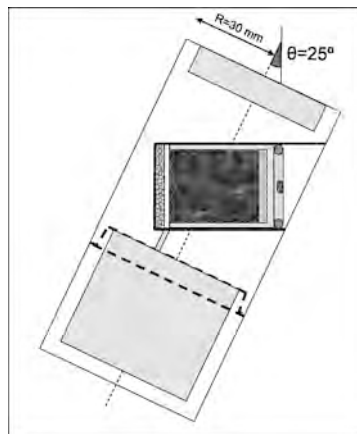


Figura. 1. Esquema del dispositivo para rotor de ángulo fijo con testigo de suelo.

de velocidades de centrifugación, donde las condiciones de partida del suelo puedan representar situaciones habituales y naturales de la muestra.

En todos los casos se analizan químicamente los extractos para evaluar la especiación de algunos elementos de la solución, y determinar en qué medida esta especiación puede verse alterada por las condiciones operativas.

Otros parámetros que han sido considerados en la optimización del procedimiento son el tiempo de centrifugación y la temperatura.

Entre todos los elementos presentes en el extracto, el interés principal se centra en radionucleidos de la serie natural del ^{238}U , ya que la influencia que puedan tener las condiciones operativas, determina la interpretación de resultados basados en el extracto de solución de suelo para múltiples usos, por ejemplo, para la evaluación de transferencia de estos radionucleidos entre el suelo y las plantas [4].

REFERENCIAS

1. Nambu K., Patrick A.W., van Hees P.A.W., Essen S.A., Lundström U.S., *Geoderma*, 127, 263–269 (2005).
2. McCartney, J.S., Zornberg, J.G. (2005). The centrifuge permeameter for unsaturated soil (CPUS). *Advanced experimental unsaturated soil mechanics*. Tarantino, Romero & Cui (eds). 299-304.
3. Caputo M.C., Nimmo J.R., *Water Resource Research*, **41**, W11504 (2005).
4. Blanco Rodríguez P., Vera Tomé, F., Lozano J.C., *Sci. Total. Environ.*, **284**, 167-175 (2002).

Termodinámica

Análisis calorimétrico del crecimiento en cultivo de enterobacterias

N. Lago¹, J.L. Legido², I. Arias³, L.M. Casás⁴

¹Servicio de Farmacia del Complejo Hospitalario Universitario de Vigo, natividad.lago.rivero@sergas.es

²Departamento de Física aplicada, Facultad de Ciencias, Universidad de Vigo, xllegido@uvigo.es

³Servicio de Farmacia del Complejo Hospitalario Universitario de Vigo, isaac.arias.santos@sergas.es

⁴Departamento de Física aplicada, Facultad de Ciencias, Universidad de Vigo, lmcasas@uvigo.es

Objetivo

Valorar la aportación de la microcalorimetría en el estudio e identificación de enterobacterias.

Material y métodos

Utilizamos un microcalorímetro de conducción calorífica tipo Calvet, en cuyo recinto interior se sitúan dos células (experimental y testigo) de acero inoxidable con tapón roscado de teflón perforado en el centro, por donde se pasa la aguja conectada a la jeringa. En el interior del microcalorímetro se mantiene una temperatura constante de 37°C.

Partimos de las cepas de *Proteus mirabilis* (CECT 170) y *Klebsiella pneumoniae* (CECT 144). Ajustamos su concentración a la turbidez correspondiente a 0,5 de la escala Mcfarland (Densichek®), a partir de la que se hacen diluciones en suero fisiológico hasta obtener muestras que nos permitan alcanzar concentraciones finales de 10^6 , 10^5 , 10^3 y 10 UFC/ml [1].

Se utiliza como medio de cultivo Soja-caseína digerida.

En la célula testigo se introducen 7ml de medio de cultivo más 1ml de suero fisiológico, y en la experimental 7ml de medio de cultivo. Ambas células se introducen en el microcalorímetro y se dejan estabilizar durante aproximadamente hora y media, momento en el que se introduce en la célula experimental 1ml de la concentración establecida.

El calibrado del equipo se realizó eléctricamente utilizando como fuente de corriente constante un EJP30 Setaram [2].

Resultados

Representando la diferencia de potencia calorífica frente al tiempo obtenemos las gráficas de crecimiento de las dos bacterias estudiadas a diferentes concentraciones, en las que se pueden identificar las fases de latencia, exponencial o logarítmica, mantenimiento y muerte celular.

Cada bacteria presenta un perfil de crecimiento que se repite a todas las concentraciones estudiadas. En el caso de *P. mirabilis*, destacan dos fases metabólicas, separadas por un periodo de latencia de aproximadamente 2 horas. Sin embargo, el termograma de *K. pneumoniae* se caracteriza por una fase de actividad seguida por un incremento de voltaje que se prolonga en el tiempo que dura la experiencia (Figura 1).

En la fase logarítmica de la curva de crecimiento de ambas bacterias, los datos obtenidos se han ajustado a una ecuación de tipo exponencial, y aplicando logaritmos nos permite conocer el valor de la constante de crecimiento (K) de la bacteria [3].

$$\ln P_t = \ln P_0 + k \times t \quad (1)$$

Además, sabemos que el tiempo de generación G , tiempo que tarda una población en duplicar su número viene dado por la expresión:

$$G = \frac{(\ln 2)}{k} \quad (1)$$

Por lo tanto, a partir del análisis matemático de los resultados podemos conocer el valor de la constante de crecimiento y tiempo de generación, parámetros característicos de cada bacteria que permiten conocer el comportamiento del cultivo de una bacteria en diferentes condiciones.

Conclusiones

Los termogramas microcalorimétricos de los cultivos bacterianos puros permiten identificar la especie bacteriana a partir de la energía desprendida consecuencia de su metabolismo. Además, el análisis matemático de los resultados aporta el valor de parámetros propios de cada microorganismo, constante de crecimiento y tiempo de generación, facilitando la identificación de cada enterobacteria.

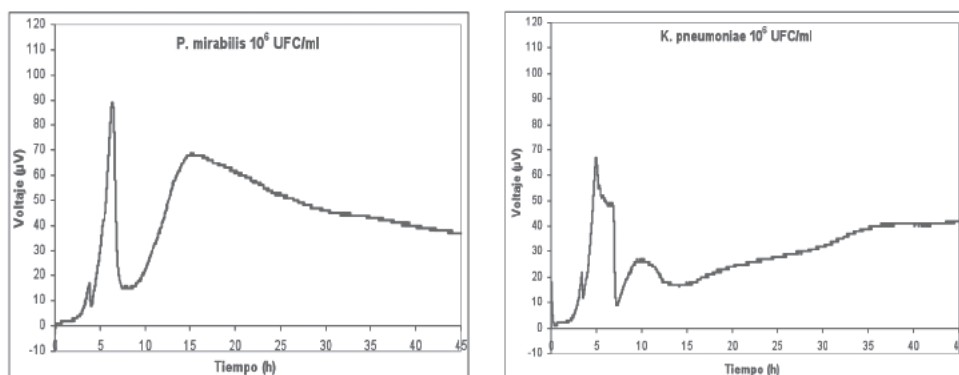


Figura 1. Termograma de *P. mirabilis* y *K. pneumoniae* (10^6 UFC/ml)

REFERENCIAS

1. Paz Andrade M.I. (1967). Les Développements Récents de la Microcalorimétrie et de la Thermogenese, 1st Ed. Paris: CRNS.
2. Lago, N., Legido, J.L., Paz-Andrade M.I., Arias, I., Casás L.M.. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*. DOI 10.1007/s10973-010-1175-0 (2010)
3. Ma J., Qi W.T., Yang L.N., Yu W.T., Xie Y.B., Wang W., Ma X.J., Xu F., Sun L.X. *Journal of Microbiological Methods* 68, 172-177 (2007)

Agradecimientos. A María Perfecta Salgado González y Sofía Baz Rodríguez por su colaboración en la realización de las medidas técnicas, a la “Agrupación Estratégica de Biomedicina (INBIO-MED)” financiada por la “Xunta de Galicia” y al proyecto 10 PXIB 310 153 PR financiado por la Consellería de Economía e Industria de la “Xunta de Galicia”.

Aplicación de la Metodología de Monitorización de Sistemas de la Agencia Internacional de la Energía (IEA) a la Evaluación Energética Experimental de los Sistemas Activos del SP3 del PSE-ARFRISOL

J.A. Díaz Angulo, J.A. Ferrer Tevar, M. R. Heras.

Unidad de Eficiencia Energética en la Edificación, CIEMAT; alberto.diaz@ciemat.es

Unidad de Eficiencia Energética en la Edificación, CIEMAT; ja.ferrer@ciemat.es

Unidad de Eficiencia Energética en la Edificación, CIEMAT; mrosario.heras@ciemat.es

Dentro del grupo de análisis energéticos de la Unidad de Investigación en la edificación (UiE3) del CIEMAT, se está desarrollando una metodología de evaluación energética mediante monitorización, de sistemas de climatización basados en captadores solares térmicos y refrigeración por absorción, metodología que se valida mediante su aplicación en 5 edificios con este tipo de sistemas en condiciones reales de uso. La metodología desarrollada está en concordancia con los trabajos que se desarrollan en la Agencia Internacional de la Energía, dentro del programa de Calor y Frío Solar (SHC - Solar Heating and Cooling, www.ica-shc.org), al que España está adscrita.

En la metodología de evaluación desarrollada, los sistemas objeto de análisis, se adaptan a un sistema de referencia (Figura 1 y Tabla 1), en el que se mide el intercambio de calor entre los diferentes subsistemas y entre estos y el medio. A partir de las medidas realizadas se obtienen una serie de coeficientes adimensionales (Fracción Solar, COP, rendimientos de máquinas y subsistemas etc.) que permiten determinar la calidad del sistema, obteniendo una evaluación, tanto de forma cuantitativa como cualitativa de su funcionamiento, y permitir su comparación con otros sistemas, independiente de sus características y dimensiones.

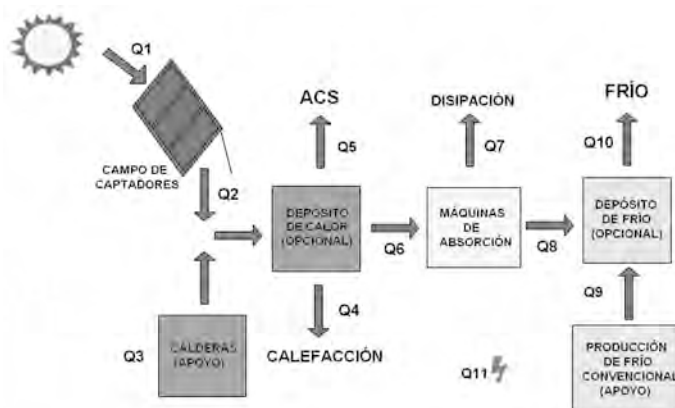


Figura 1. Esquema general de Sistemas de Calefacción y Frío Solar.

Q1	Irradiación Solar en los Captadores	Q7	Disipación de la Máquina de Absorción
Q2	Salida Termal de los Captadores	Q8	Salida Fría de las Máquinas de Absorción
Q3	Salida Termal de la Caldera	Q9	Salida Fría de la Enfriadora de Apoyo
Q4	Consumo de la Calefacción	Q10	Salida Fría a la distribución de Frío
Q5	Consumo de Agua Caliente Doméstica	Q11	Consumos eléctricos
Q6	Entrada de Calor en Máquinas Absorción		

Tabla 1. Valores de energía comunes a todos los sistemas que son necesarios en el método

En la práctica, la metodología se está aplicando dentro del PSE – ARFRISOL, en el cual se han construido 5 Edificios Contenedores – Demostradores de Investigación; bioclimáticos – que en todos los casos cuentan con sistemas de calor y frío solar.

La aplicación de esta metodología de evaluación experimental, está resultando de alto interés, no sólo porque permite evaluar los sistemas que se tienen en los CDdIs, si no porque además hace factible una comparación rigurosa pero a la vez sencilla entre los 5 edificios y con otros con sistemas de climatización similares. En cada edificio, se dispone de dos sistemas de adquisición de datos, uno dedicado al control del edificio y otro exclusivo para monitorización, a partir de las cuales se puede obtener valores energéticos reales. En primer lugar se ha estudiado el caso concreto del Edificio 70 del Ciemat, Subproyecto 3 del PSE-ARFRISOL. Su sistema de Calor y Frío Solar se adapta al sistema de propuesto, y tras analizar las medidas que se tienen se decide cómo se pueden calcular las energías estacionales necesarias.



Figura 2. Ed. 70, perteneciente al SP3 de. PSE-ARFRISOL

Q1	Medida de radiación solar incidente tomada en monitorización	Q7	Cálculo directo
Q2	Cálculo directo – a partir de caudal, temperatura de entrada y de salida, datos presentes en el sistema de control	Q8	Cálculo directo
Q3	Descomposición en dos calderas, para una se tienen dos entradas y una salida; se calcula la otra a partir de tres circuitos de cálculo directo.	Q9	Cálculo a partir de tres circuitos
Q4	Cálculo a partir de dos circuitos	Q10	Cálculo a partir de dos circuitos
Q5	Cálculo a partir de dos entradas y una salida	Q11	Cálculo aproximado como suma de elementos
Q6	Cálculo directo		

Tabla 2 – Estimación de las energías necesarias a partir de las medidas existentes para el SP3.

Para su análisis se creó una herramienta informática, que unifica las medidas de los distintos sistemas en formato, frecuencia y tiempo, permitiendo realizar cálculos relativamente rápidos de series largas de datos. Automáticamente obtiene los flujos energéticos y coeficientes deseados, además de otras medidas adicionales. Esta herramienta va a permitir evaluar más sistemas.

Teniendo esta metodología como germen, y ampliándola para adquirir un conocimiento mayor, permitirá desarrollar un sistema estándar capaz de estudiar las instalaciones de climatización solar con absorción en condiciones reales de uso, de forma unificada y comparable.

REFERENCIAS

1. <http://iea-shc.org>
2. Henning, Hans Martin (2004): Solar Assisted Air Conditioning in Buildings. A Hnadbook for Planners. Spring-Verlag Wien New York. Freiburg, Germany.
3. Baruch Givoni, Man Climate and Architecture (1976) – Applied Science Publishers, Ltd.
4. Duffie, J.A. & Beckman, W.A. (1980), Solar engineering of thermal procceses, John Wiley & sons., New York.

Aplicación de la metodología de superficie de respuesta para modelar y optimizar el proceso de Electrohilatura “Electrospinning”

M. Essalhi, M. Khayet, C. Cojocar, M. C. García-Payo, P. Arribas

Departamento de Física Aplicada I, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid; Avda. Complutense s/n, 28040 Madrid. Tel. 91.3945185; Email: khayetmi@fis.ucm.es

Durante los últimos 10 años, el proceso de electrohilatura “*electrospinning*” ha tenido una amplia atención como técnica de procesamiento de polímeros para la aplicación potencial en Biomédica, ingeniería de tejidos, nano-sensores y técnicas de filtración. Este renovado interés se debe a su capacidad para fabricar fibras con diámetros de tamaño que varían de la escala micrométrica a nanométrica consiguiendo de esta forma películas o membranas nanofibrosas poliméricas de gran superficie específica (mayor Área/Volumen).

En este trabajo se ha realizado un estudio de modelación y optimización del proceso de electrohilatura utilizando la metodología de superficie de respuesta “*Response Surface Methodology, RSM*” esta metodología consiste en un diseño estadístico factorial completo estadístico de experimentos para desarrollar un modelo predictivo para la simulación y la optimización [1].

El objetivo principal es preparar membranas nanofibrosas con pequeños diámetros de fibras y con distribuciones estrechas. Para llevar acabo este estudio se ha diseñado y construido el dispositivo experimental necesario para la fabricación de nanofibras y membranas nanofibrosas de flúor de polivinilideno (PVDF) mediante la técnica de electrohilatura aplicando un alto voltaje. Las partes más importantes del dispositivo son la fuente de alto voltaje, la bomba de infusión que permite obtener un flujo continuo de disolución polimérica en la punta de la aguja y la distancia entre la punta de la aguja y la base colectora “*air gap*”. La respuesta del modelo ha sido la función pérdida de calidad “*the quality loss function*” Y [3], que tiene en cuenta los efectos de segundo grado tanto de la media aritmética ponderada del diámetro de las fibras (*Ec. 1*) como la desviación estándar (*Ec.2*) [2].

$$Y = \lambda_w^2 + S_w^2 \quad (1)$$

$$\lambda_w = \lambda_0 + \frac{h}{N} \sum_{j=1}^m u_j \cdot FC_j \quad S_w = \sqrt{\left(\frac{1}{N} \cdot \sum_{j=1}^m (u_j^2 \cdot FC_j) - \left(\frac{1}{N} \cdot \sum_{j=1}^m (u_j \cdot FC_j) \right)^2 \right) \cdot h^2} \quad (2)$$

donde:

$$u_j = \frac{\lambda_{cj} - \lambda_0}{h} \quad \text{y} \quad h = \frac{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}}{m}$$

λ_0 es la característica dominante del conjunto estadístico que corresponde al pico más alto,

m es el número de clases “*Bins*”, N es el número de datos,

λ_{cj} es el *Bin centro*, FC_j la frecuencia corresponde al Bin, j .

Se ha trabajado con una disolución polimérica de 25 % de PVDF y 80/20 % de N, acetamida N-dimethyl (DMAC) /Acetona (en peso). Las variables del proceso son el voltaje $U(x_1)$, la distancia entre la aguja y el colector $A(x_2)$ y el flujo de la disolución polimérica $F(x_3)$ con rangos de variación de $10.5 \text{ kV} < U < 24.5 \text{ kV}$; $11.77 \text{ cm} < A < 28.33 \text{ cm}$ y $1.22 \text{ ml/h} < F < 3.28 \text{ ml/h}$.

Se han realizado 10 experimentos siguiendo el diseño factorial completo experimental. Las membranas nanofibrosas obtenidas se han caracterizado mediante el microscopio electrónico de barrido de emisión de campo (FESEM). Una vez obtenidas las imágenes SEM de la superficie de las membranas nanofibrosas se ha empleado el software *Image Tool por Windows* (version 3.00) para determinar el diámetro medio de las nanofibras así como el histograma de la distribución de los diámetros de las fibras. La ecuación (3) muestra el modelo factorial desarrollado con interacciones entre parámetros de variables del proceso aplicando la técnica de regresión.

$$\hat{Y} = -5.445 + 0.11U + 0.393A + 4.436F - 0.013UA - 0.046UF - 0.184AF + 3.741 \times 10^{-3} UAF \quad (3)$$

donde, $10.5 \leq U \leq 24.5 \text{ (kV)}$; $11.77 \leq A \leq 28.23 \text{ (cm)}$; $1.22 \leq F \leq 3.28 \text{ (ml/h)}$.

La figura (1) muestra algunos resultados simulados de la respuesta \hat{Y} en función de las variables del proceso. Se ha aplicado el análisis de varianza (ANOVA) para chequear la bondad del ajuste del modelo y el análisis t-Student para estudiar los efectos totales de los factores [2].

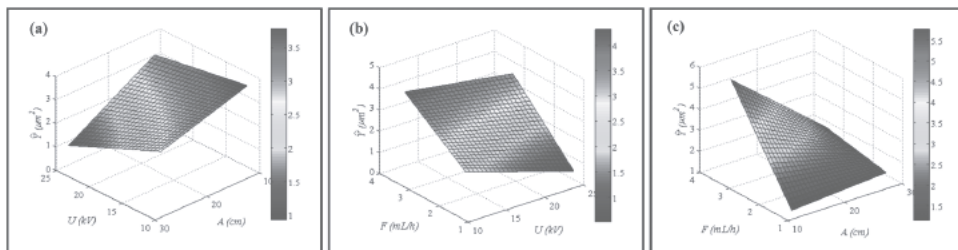


Fig. (1): Efecto de los parámetros de Electrohilatura en la respuesta \hat{Y} para: (a) U 17.5 (kV), (b) F 2.25 (mL/h) y (c) A 20 (cm)

Como se puede observar, el incremento de U (kV) y A (cm) disminuye \hat{Y} sobre todo cuando alcanzan altos valores. También se observa que el aumento de U (kV) disminuye \hat{Y} sobre todo a bajos valores de F (ml/h); mientras que el incremento de F (ml/h) aumenta \hat{Y} . Por último como se puede observar, la disminución de F (ml/h) reduce \hat{Y} sobre todo cuando A (cm) es menor. Sin embargo, los efectos de interacciones entre U y F es menor que el efecto de interacción entre U , A y también entre F , A .

Se ha empleado el método de Monte Carlo para optimizar la respuesta objetivo \hat{Y} con el fin de minimizarla. La respuesta óptima obtenida ha sido para los parámetros: $U = 24.1 \text{ kV}$, $A = 27.7 \text{ cm}$ y $F = 1.23 \text{ mL/h}$, obteniéndose un valor óptimo de $\hat{Y} = 0.328 \mu\text{m}^2$.

Se ha confirmado este valor experimentalmente utilizando las condiciones de operación óptimas determinadas. El valor experimental de \hat{Y} obtenido ha sido $0.314 \pm 0.099 (\mu\text{m}^2)$ con un coeficiente de desviación de 4.3 % respecto al valor simulado. La

figura (2) muestra la imagen *SEM* y el histograma de los diámetros de las fibras de la membrana nanofibrosa de *PVDF* preparada bajo las condiciones óptimas.

Las condiciones óptimas, han garantizado la fabricación de membranas nanofibrosas con tamaños de diámetros de fibras pequeños y con una estrecha distribución.

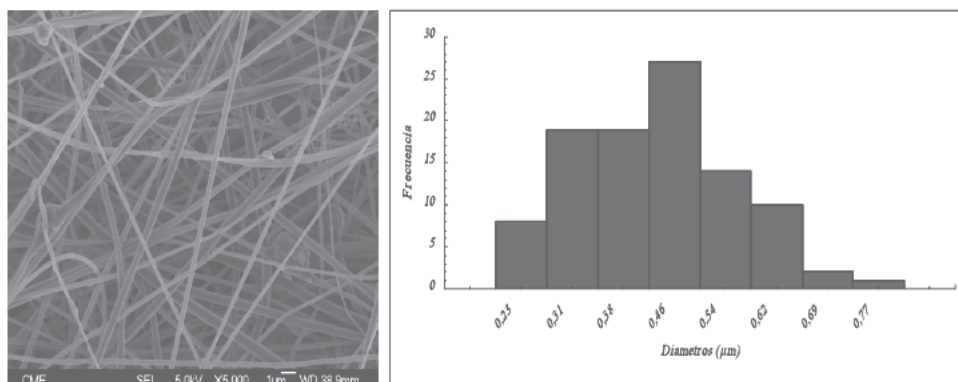


Fig. (2): Imagen *SEM* y el histograma de la distribución de diámetros de las fibras de la membrana nanofibrosa fabricada aplicando las condiciones óptimas.

- [1] D.C Montgomery, Design and Analysis of Experiments (5th ed.), John Wiley & Sons, New York, 2001.
- [2] D. Taloi, C. Bratu, E. Florian, E. Berceanu; "Optimization of the metallurgical processes", Didactica & Pedagogica Publisher, Bucharest, 1983.
- [3] J. Alexis, "Taguchi method applied for industrial practice: Experimental designs"; Technica Publisher, Bucharest, 1999.

Aplicación del método de las medias a la evaluación energética de cerramientos constructivos

I. Naveros, M.J. Jiménez, M.R. Heras

Unidad de Eficiencia Energética en la Edificación. CIEMAT; iban.naveros@psa.es.

El elevado consumo energético que se debe en la actualidad al acondicionamiento de edificios hace necesario acometer acciones destinadas a incrementar el ahorro energético en este sector. Para conseguir un ahorro energético adecuado es necesario incluir los criterios energéticos en las primeras etapas del diseño para lo cual es necesario disponer, con la mayor exactitud posible, de los parámetros que caracterizan el comportamiento térmico de los cerramientos a utilizar. Estos parámetros son necesarios para predecir el consumo energético de los edificios mediante programas de simulación o herramientas de cálculo simplificadas, dependiendo del nivel de exactitud requerido.

La necesidad, pues, de mejorar la eficiencia energética en el sector de la edificación, ha motivado un impulso en todos los temas relacionados con la investigación en este campo (refs, 1 a 4), así como en la actualización y mejora de las normativas que en materia de ahorro y eficiencia energética se aplican a las nuevas construcciones y a aquellas antiguas que deban ser reformadas. En este sentido debe tenerse en cuenta la actividad del Grupo de Trabajo 13 del Comité Técnico 89 del Comité Europeo de Normalización (TC89 WG13 del CEN) que está elaborando una norma Europea sobre Ensayos in-situ, de componentes, sistemas constructivos y edificios, como actualización y extensión de la ISO 9869.

El ensayo de componentes de tamaño real mediante células de ensayo y bajo condiciones meteorológicas reales (ref. 5) permite la caracterización de todo tipo de cerramientos, y es significativamente útil para aquellos que no sería posible caracterizar utilizando los procedimientos tradicionales basados en experiencias en laboratorio con condiciones estacionarias, proporcionando estimaciones realistas de los parámetros.

Para este tipo de ensayos el CIEMAT dispone en el LECE (Laboratorio de Ensayos Energéticos para Componentes de la Edificación) de las denominadas, “células de ensayo”, que consisten en recintos a escala real, térmicamente aislados del exterior en toda su envolvente excepto en la zona ocupada por el cerramiento bajo estudio. Estas células están equipadas con la instrumentación necesaria para la medida de las magnitudes meteorológicas y de todas aquellas necesarias para establecer el balance energético del sistema.

A pesar de las ventajas de los ensayos en condiciones meteorológicas reales existe el inconveniente de que estos llevan implícito el régimen dinámico, que complica su análisis y la correcta determinación de los parámetros requeridos. Existen diversos métodos de análisis para estimar los parámetros de interés a partir de este procedimiento experimental (ref 6). Estos métodos van desde el método de las medias, a los métodos dinámicos considerando modelos lineales y con parámetros temporalmente invariantes. En todos los casos debe tenerse en cuenta la validación basada en la consistencia física de los resultados.

El análisis de ensayos de componentes constructivos llevados a cabo bajo condiciones meteorológicas reales mediante el método de las medias permite la aplicación de las ecuaciones estáticas. Aunque esto simplifica significativamente el análisis, sólo es posible si se cumplen determinadas hipótesis, lo que limita la aplicabilidad de este

método. En este trabajo se analizan las prestaciones y limitaciones del método de las medias aplicado al análisis de componentes constructivos ensayados en condiciones dinámicas, considerando el análisis de un muro homogéneo y opaco ensayado en el LECE.

El método de las medias basa su validez en la integración para un periodo de tiempo determinado de la ecuación dinámica de balance energético y el uso de medias durante ese intervalo para la estimación de la integral, considerando un periodo de integración suficientemente largo para poder despreciar los términos de acumulación. Por ello, uno de los aspectos que se analiza en este trabajo es que el periodo de integración que permite llevar a cabo esta simplificación depende de las características térmicas del componente y de las condiciones meteorológicas bajo las que se lleva a cabo el ensayo. Se han considerado periodos de integración de 1 a 10 días. Observándose resultados aceptables para periodos de integración de 5 días. Periodos de integración mayores no muestran mejoras significativas.

Por otra parte las ecuaciones de balance energético que se utilizan habitualmente para la caracterización térmica de los componentes son ecuaciones simplificadas, por lo que en este trabajo también se analiza la validez de las simplificaciones habituales. Para analizar este aspecto se ha determinado el mínimo conjunto de variables necesario para la caracterización energética del muro. Para lo cual se ha analizado la influencia de la radiación solar global, la radiación de onda larga y la velocidad del viento. Se han observado mejoras significativas en los resultados cuando se considera la radiación global y la velocidad del viento.

Para este análisis se han utilizado los datos experimentales registrados durante un año. En el interior de la célula de ensayo se han establecido diferentes temperaturas de consigna para invierno y verano de forma que se maximice la diferencia de temperatura entre el interior y el exterior de la célula de ensayo. Se han registrado las medidas de las siguientes variables: Temperatura de aire interior y exterior, temperatura de superficie interior y exterior del muro, densidad de flujo térmico a través del muro, velocidad y dirección del viento, radiación global vertical y radiación de onda larga en la superficie del muro. Cada una de estas variables se lee cada segundo y su media se registra cada minuto.

Agradecimientos. El PSE-ARFRISOL, Referencia PS-120000-2005-1, es un Proyecto científico-tecnológico singular de carácter estratégico aceptado por el Plan Nacional de I+D+I 2004-2007, cofinanciado con Fondos FEDER y subvencionado por el Ministerio de Educación y Ciencia (MEC). Los autores agradecen esta financiación así como la colaboración a todos los miembros del Consorcio de PSE-ARFRISOL.

REFERENCIAS

1. Proyecto Singular Estratégico sobre Arquitectura y Frío Solar, www.arfrisol.es
2. DYNamic Analysis, Simulation and Testing applied to the Energy and Environmental performance of buildings, www.dinastee.info
3. IEA Implementing Agreement on Energy Conservation in Buildings and Community Systems (ECBCS), www.ecbcs.org
4. IEA Solar Heating and Cooling Programme (SHC), www.iea-shc.org.
5. The PASSYS Services. Summary report of the PASSYS Project. Eds. P. Wouters, L. Vandaele, BBRI, EC DG XII, Brussels, 1994. EUR 15113 EN
6. Jiménez M. J., Madsen H. 2008. Models for Describing the Thermal Characteristics of Building Components. Building and Environment. Special issue on Outdoor testing, analysis and modelling of building components. 43, pp. 152-162.

Calculo DFT del Potencial Redox Absoluto de la N-BOC-Morfolina en Disolución No Acuosa

L. Haya¹, F. J. Sayago², A. M. Mainar¹, C. Cativiela², J. S. Urieta¹

¹Grupo de Termodinámica Aplicada y Superficies, I3A-Universidad de Zaragoza, Zaragoza, Spain; gathers@unizar.es

²Amino Acids & Peptides Group, IUCH, ICMA-Universidad de Zaragoza, Zaragoza, Spain; cativiela@unizar.es

La morfolina es una amina heterocíclica secundaria sumamente versátil que se emplea principalmente en la fabricación de aceleradores del caucho, como inhibidor de la corrosión en calderas y en la síntesis de agentes protectores de cosechas y abrillantadores. La funcionalización sobre el carbono 2 del anillo, proporciona compuestos que son ampliamente utilizados como componentes de una extensa variedad de productos farmacológicos utilizados para el tratamiento de depresiones clínicas, hiperactividad y déficit de atención [1,2].

La funcionalización de la posición α puede realizarse vía oxidación electroquímica, que es una técnica alternativa de preparación de compuestos que puede resultar muy ventajosa en muchos casos ya que nos permite llevar a cabo, con buenos rendimientos, procesos que son difíciles o imposibles de realizar mediante los métodos convencionales. La optimización de estas reacciones exige conocer la reactividad electroquímica de las moléculas que intervienen y la cinética del proceso, para lo cual es necesario la determinación de una magnitud de equilibrio como es el potencial estándar correspondiente al proceso redox implicado.

El objetivo planteado en este trabajo fue la determinación, mediante cálculos cuánticos, del potencial redox formal de la N-Boc-morfolina (fig. 1), un derivado de la morfolina susceptible de α -alcoxilación mediante oxidación anódica en medio metanólico. Este compuesto puede servir de modelo para la obtención de intermedios y productos finales de interés farmacológico.

El potencial formal redox, $E^{\circ'}$, es una magnitud no asequible experimentalmente de forma directa cuando el proceso es irreversible. Su oxidación tiene lugar mediante la pérdida consecutiva de dos electrones [3]. El cambio de energía de Gibbs asociado a la pérdida de esos dos electrones en la α -alcoxilación, puede interpretarse en el contexto de un ciclo termodinámico (fig. 2), en el que la energía de Gibbs neta incluye la energía asociada a la transferencia de electrones en fase gas desde las especies reducidas al electrodo, $\Delta G^{\circ}_{(g)}$, y las energías de solvatación de todas las especies involucradas en el proceso, $\Delta G^{\circ}_{(solv)}$.

El cálculo se ha realizado con ayuda de Gaussian 09 a dos niveles de cálculo distintos, Hartree-Fock (HF) y Teoría del Funcional de Densidad (DFT). Los cálculos para las especies en disolución fueron realizados mediante el Método de Polarización del Continuo (PCM).

El valor del cambio en la energía de Gibbs, correspondiente a la primera semi-reacción ($\Delta G^{\circ}(\text{dis}, I)$), así como su potencial redox absoluto y la energía del HOMO se pueden observar en la tabla 1.

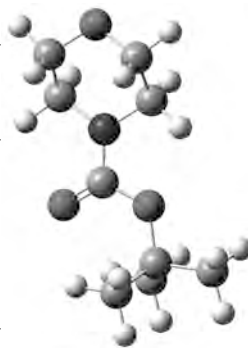


Figura 1. N-BOC-morfolina

De la comparación de estos resultados con los obtenidos cuando el oxígeno es sustituido por carbono se observa que el proceso de oxidación de *N*-Boc-morfolina. Además los resultados obtenidos cuántica-mente están de acuerdo con los experimentales obtenidos mediante voltametría cíclica.

En las voltametrías cíclicas de *N*-Boc-morfolina aparece un único pico de oxidación, lo cual se pone también de manifiesto en los cálculos teóricos. Cuando se calcula el segundo potencial de oxidación se observa que este es inferior al primero y que por tanto el proceso tiene lugar mediante un mecanismo de desproporción el que los dos electrones son intercambiados en una única etapa.

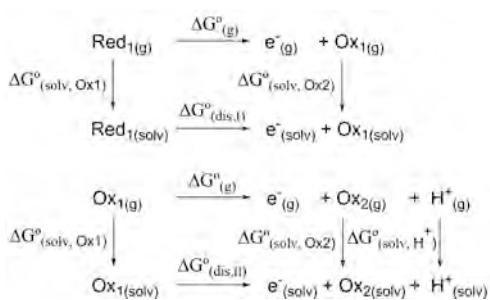


Figura 2. Ciclo termodinámico correspondiente a las dos semi-reacciones de oxidación de la *N*-Boc-morfolina

Método	Base	$\Delta G^\circ_{(dis)}$ (kcal/mol)	E° (V)	E_{HOMO} (eV)
HF	6-31G(d)	125.5	5.442	9.94
	6-31G(d,p)	125.2	5.429	10.74
	6-311++G(2df,2p)	136.0	5.463	10.07
B3LYP	6-31G(d)	139.8	6.061	6.24
	6-31G(d,p)	139.7	6.059	6.24
	6-311++G(2df,2p)	149.6	6.487	6.58

Tabla 1 Energía de Gibbs estándar, potencial redox absoluto y energía del HOMO correspondientes a la primera semi-reacción de oxidación

Agradecimientos

Los autores agradecen la financiación del Ministerio de Ciencia e Innovación – FEDER (grant CTQ2010-17436), del Departamento de Ciencia, Tecnología y Universidad del Gobierno de Aragón-Fondo Social Europeo (Grupos E40 y E52) y al Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A) - Universidad de Zaragoza por el tiempo de cálculo en HERMES.

REFERENCIAS

- Hajos, M., Fleishaker, J. C., Filipiak-Reisner, J. K., Brown, M. T., Wong, E. H. F., *CNS Drug Reviews*, **10**, 23-44 (2004).
- Kelley, J. L., Musso, D. L., Boswell, G. E., Soroko, F. S., Cooper, B. R., *J. Med. Chem.*, **39**, 347-349 (1996)
- Nishitani, T., Horikawa, H., Iwasaki, T., Matsumoto, K., Inoue, I., Miyoshi, M., *J. Org. Chem.*, **47**, 1706-1712 (1982).

Codigestión anaerobia de residuos de la industria del tomate y de matadero en modo semicontinuo

F. Cuadros¹, A. González¹, M.J. Roldán¹, F. Rubiales¹, A. Ruiz², F. López³

¹Departamento de Física Aplicada, Universidad de Extremadura; almuđenagg@unex.es

²Área de Máquinas y Motores Térmicos, Universidad de Extremadura; aruiz@unex.es

³Departamento de Expresión Gráfica, Universidad de Extremadura, ferlopez@unex.es

La digestión anaerobia es un proceso biológico en el que se degrada la materia orgánica por la acción concertada de una serie de grupos bacterianos en ausencia de oxígeno. Los principales productos finales de estas reacciones son un gas denominado biogás susceptible de un aprovechamiento energético para generar calor y/o electricidad, ya que está formado mayoritariamente por metano (50-75% dependiendo del sustrato) y dióxido de carbono (50-25%) pero también contiene nitrógeno, hidrógeno, sulfuro de hidrógeno y amoníaco, los cuales suponen menos del 1% del volumen total del biogás y un efluente digerido, que es una mezcla de productos minerales y otros compuestos de difícil degradación por lo que este efluente, tras sufrir una serie de tratamientos, puede ser utilizado como enmendante agrícola [1]. La digestión anaerobia es un método de tratamiento ideal para biomasas residuales con alto contenido en humedad y en materia orgánica [2], como es el caso de los residuos de la industria de procesamiento del tomate y de mataderos de porcino, que además de generarse en grandes cantidades en la Comunidad Autónoma de Extremadura son altamente contaminantes. Por todo ello, consideramos que esta tecnología de tratamiento puede ser adecuada para revalorizar energéticamente dichos desechos.

Cabe destacar que no sólo es posible degradar anaeróbicamente residuos aislados sino que la bibliografía demuestra que el tratamiento conjunto de residuos orgánicos diferentes, denominado co-digestión, permite aprovechar la sinergia de las mezclas, compensando las carencias de cada uno de los sustratos por separado. Así, se han probado residuos de matadero, estiércol y residuos de frutas y verduras [3] o lodos de aguas residuales y estiércol de cerdo [4]

Los residuos de la industria del tomate se caracterizan por presentar un bajo pH y escasa capacidad tampón, pero un alto contenido en carbono. Los residuos de matadero presentan características contrarias, un valor de pH más elevado, mayor capacidad tampón, altas concentraciones de nitrógeno pero menor contenido en carbono, por tanto los parámetros físico-químicos de estos residuos nos hacen pensar que la digestión conjunta permitirá obtener mayores producciones de biogás y una mayor estabilidad del proceso que al digerir dichos residuos de forma aislada.

Para realizar las experiencias de codigestión anaerobia se han probado diferentes mezclas de los residuos en estudio, (80% matadero/20% tomate; 60% matadero/40% tomate; 40% matadero/60% tomate) utilizando digestores que operan en modo semicontinuo, éstos están constituidos por un

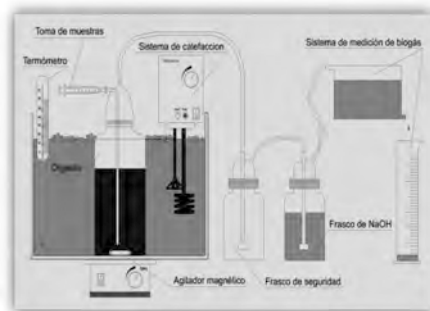


Figura 1. Esquema del dispositivo experimental semicontinuo.

tarro de vidrio de 2 litros de capacidad, unido a una tapadera móvil que presenta un orificio al cual se acopla una pieza que dispone de dos salidas. Una de ellas está unida a un tubo central que se sumerge en el medio de reacción, a través de esta salida se extrae el lodo digerido y se introduce el sustrato en el interior del reactor con ayuda de una jeringuilla. La otra salida se utiliza para evacuar el gas producido. Este es conducido mediante gomas hasta dos frascos lavadores conectados en serie, y posteriormente llega a un depósito de 5 litros de capacidad lleno de agua. El segundo frasco lavador contiene una disolución al 20% en peso de hidróxido sódico que permite eliminar el dióxido de carbono presente en el biogás. El primer frasco está vacío ya que su función es evitar el retroceso de la disolución y su llegada hasta el reactor. El biogás, ya libre de dióxido de carbono, al llegar al depósito lleno de agua, la desplaza y ésta cae en una probeta graduada. El volumen de agua recogido es igual al volumen de metano producido. El medio de reacción se mantiene a 38°C sumergiendo el reactor en un baño de agua calentada mediante una resistencia eléctrica. El contenido del reactor se homogeneiza utilizando un agitador magnético y un diablillo.

Los resultados obtenidos corroboran la hipótesis inicial, ya que se observa que al añadir residuos de matadero a los residuos de tomate se obtienen mejores rendimientos en la producción de biogás y mayores degradaciones del residuo que si se alimenta únicamente con residuos de tomate.

	80/20	60/40	40/60
TRH	33	11	10
Reducción DQO total (%)	62,96	65,72	51,21
m ³ metano/m ³ sustrato día	18,28	18,72	13,74

Tabla 1. Resultados experimentales de la codigestión anaerobia de residuos de matadero con residuos de la industria del tomate en modo semicontinuo.

Por otro lado, se demuestra que para alcanzar los mejores resultados es necesario añadir altas concentraciones de matadero a los residuos del tomate. En nuestro caso, se observa que la proporción óptima en lo que respecta a producción de metano y a degradación del residuo es 60% matadero/40% tomate. Si bien, los resultados obtenidos permiten afirmar que la técnica de digestión anaerobia es muy adecuada para reducir la carga contaminante de estos residuos en todas las proporciones estudiadas.

REFERENCIAS

1. Bermudez JJ., Canovas M., Manjon A., Iborra JL., Howell JA. (1988) La digestión anaerobia. Secretariado de Publicaciones Universidad de Murcia.
2. IDAE, BESEL S.A. (2007). Biomasa: Digestores anaerobios. IDAE.
3. Alvarez R., Lidén G. *Renewable Energy*. **33** 726-734 (2008)
4. Murto M., Björnsson L., Mattiasson B. *Journal of Environmental Management*. **70** 101-107 (2004)

Conductividad térmica de nanocompuestos basados en nanotubos de carbono y grafeno en resina epoxi

M. Khayet^{*1}, M. Gallego², J.M. Ortiz de Zárate¹, R. Verdejo², M.A. López-Manchado²

¹Departamento de Física Aplicada I, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid, Avda. Complutense s/n, 28040, Madrid. * khayetm@fis.ucm.es; Tel. +34-91-3945185.

²Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros, CSIC, Juan de la Cierva, 3 28006-Madrid.

En los últimos años la conductividad térmica de resinas epoxi curadas ha sido ampliamente investigada debido a su creciente importancia y utilidad para la disipación de energía en la industria electrónica. La metodología más considerada para mejorar el transporte térmico de las resinas epoxi es la adición de cargas conductoras basadas en carbono, o bien el uso de cargas metálicas [1]. Sin embargo, el efecto de la adición de las cargas en la conductividad térmica, comparando las resinas curadas (fase sólida) con las resinas sin curar (fase líquida), aún no ha sido estudiado de forma rigurosa. En general, se están empleando procedimientos indirectos para medir la conductividad térmica. Además, existe gran interés y se están realizando importantes esfuerzos a nivel internacional a fin de aprovechar las propiedades de transporte de nanotubos de carbono (CNT) en nanocompuestos poliméricos, pero con un éxito desigual. Si bien las mejoras de la conductividad eléctrica se han cifrado en varios órdenes de magnitud, la conductividad térmica muestra en el mejor de los casos una dependencia lineal con el contenido de CNT en la matriz polimérica [2,3]. Por otra parte, los recientes acontecimientos interesantes en la síntesis de grafeno y el estudio de sus propiedades únicas han impulsado el desarrollo de nanocompuestos basados en grafeno, grafeno funcionalizado y óxido de grafeno [4].

Es importante indicar que en la bibliografía se han comunicado incrementos en la conductividad térmica muy dispares (hasta en un orden de magnitud) por la adición de pequeñas fracciones en volumen de nano-aditivos (nanopartículas, nanopulvos, nanotubos, etc.) en un líquido o en un sólido. Esta discrepancia es, sin duda, debida al tipo de dispersante que se utiliza, la matriz empleada y al modo de preparar el nanofluido o nanocompuesto objeto de estudio, en particular de si los nano-aditivos quedan bien dispersados en la matriz líquida o sólida [5].

El objetivo de este estudio es investigar el efecto de varios tipos de nanocargas: nanotubos de carbono de pared simple (SWNT), nanotubos de carbono de pared múltiple (MWNT), nanotubos funcionalizados (f-MWNT), grafito, hojas de grafeno funcionalizado (FGS) y óxido de grafito (GO), en la conductividad térmica (λ) de una resina epoxi sin curar (líquida) y curada (sólida). Se ha estudiado el efecto de diferentes concentraciones de MWNT en la conductividad térmica. La medida de λ de la resina sin curar se ha llevado a cabo por medio de la sonda KD2 (Decagon) -basada en la técnica del hilo caliente (método transitorio de medida)- a temperaturas entre 30°C y 60°C; mientras se ha empleado el método estacionario de Lees para determinar la conductividad térmica de muestras curadas de diferentes espesores.

Los SWNT fueron suministrados de la casa Aldrich, mientras que los MWNT fueron sintetizados en el laboratorio por deposición química de vapor (CVD) [6]. Las hojas de grafeno funcionalizado fueron también preparadas en el laboratorio siguiendo el método descrito en [7].

Las nanopartículas se introdujeron en la resina a temperatura ambiente por mezcla con alto nivel de cizalla durante 8 h para asegurar una dispersión homogénea, lo cual fue corroborado por el microscopio electrónico de transmisión (TEM).

No se han detectado cambios significativos con la temperatura (en el intervalo 30-60°C). La tabla 1 muestra algunos resultados obtenidos a una temperatura de 30°C. Estos resultados son el promedio de al menos seis mediciones para cada muestra.

	k_{Liq} (W/mK)	k_{sol} (W/mK)
Resina Epoxi	0.150 ± 0.000	0.22 ± 0.07
+ 0.2% MWNT	0.162 ± 0.004	-
+ 0.6% MWNT	0.202 ± 0.004	0.29 ± 0.05
+ 1% MWNT	0.250 ± 0.000	0.38 ± 0.07
+ 0.6% f-MWNT	0.180 ± 0.000	-
+ 0.6% SWNT	0.180 ± 0.000	-
+ 1% FGS	0.150 ± 0.000	0.36 ± 0.04
+ 1% Grafito	0.176 ± 0.005	-
+ 1% GO	0.150 ± 0.000	-

Tabla 1. Conductividad térmica de nanocompuestos en fase líquida y sólida.

Los resultados indican que MWNT es la carga de carbono más eficaz para mejorar la λ de la resina Epoxi. La λ aumenta gradualmente en función de la concentración en MWNT, alcanzando una mejora del 66.7% con un 1% en peso (1.36% en volumen) de carga en la resina líquida. De forma similar, la λ de la resina curada aumenta en un 72.7% con un contenido en MWNT del 1% en peso. Se ha observado que las hojas de grafeno funcionalizado (FGS) no cambian la λ de la resina líquida, sin embargo este aditivo sí incrementa en un 63.6% la λ de la resina curada. El grafito natural mostró una leve mejora de λ , mientras que el proceso de oxidación (GO) no cambia la λ de la resina.

Estos resultados han sido interpretados basándose en la presencia de una estructura organizada de las moléculas del líquido, en la existencia de interfases sólido/líquido (resistencia interfacial), en las vibraciones fonónicas y en la posible contribución del movimiento browniano de las partículas en el caso del fluido.

REFERENCIAS

1. Han, Z., Fina, A., *Progress in Polymer Science*, **36**, 914 (2011).
2. Berber, S., Kwon, Y.K., Tománek, D., *Phys. Rev. Lett.*, **84**, 4613 (2000).
3. Hone, J., Batlogg, B., Benes, Z., Johnson, A.T., Fisher, J.E., *Science*, **289**, 1730 (2000).
4. Verdejo, R., Bernal, M.M., Romasanta, L.J., López-Manchado, M.A., *J. Mater. Chem.*, **21**, 3301 (2011).
5. Vázquez Peñas, J.R., Ortiz de Zárate, J.M., Khayet, M., *J. Appl. Phys.*, **104**, 044314 (2008).
6. Singh, C., Shaffer, M.S.P., Kozioł, K.K.K., Kinloch, I.A., Windle, A.H., *Chem. Phys. Lett.*, **372**, 860 (2003).
7. Verdejo, R., Barroso-Bujans, F., Rodríguez-Pérez, M.A., de Saja, J.A., López-Manchado, M.A., *J. Mater. Chem.*, **18**, 2221 (2008).

Determinación de propiedades interfaciales de CH₄, H₂O y CO₂ mediante simulación molecular

J. M. Míguez*, D. González-Salgado, P. Gómez-Álvarez,
J. L. Legido, M.M. Piñeiro

Departamento de Física Aplicada, Universidade de Vigo; miguezjm@uvigo.es*.

Este trabajo se engloba en un proyecto de investigación cuyo objetivo caracterizar mediante métodos de Simulación Molecular (Monte Carlo) el comportamiento del gas natural en un tipo de yacimientos no convencionales conocidos con el nombre de “Tight Gas Reservoirs (TGR)”. Este tipo de depósitos posee una porosidad elevada, y el análisis de la modificación de las condiciones originales de adsorción debido a la inyección de un fluido externo para forzar la recuperación del gas natural es de gran importancia desde un punto de vista práctico. De ahí que el objetivo de este trabajo sea determinar las propiedades interfaciales de agua, metano, y dióxido de carbono mediante las técnicas de simulación molecular (Monte Carlo) tanto para fluidos puros como para sus mezclas. En una primera fase se ha abordado el estudio de las interfases líquido vapor de cada uno de los fluidos puros, usando simulación molecular en una caja bifásica. Este procedimiento permite obtener directamente propiedades interfaciales como la densidades de coexistencia de líquido y vapor, tensión interfacial y anchura de interfase, permitiendo la selección del modelo molecular [1] más conveniente para cada una de las sustancias, estudio necesario debido a la gran variedad de modelos que han sido desarrollados para cada una de estas sustancias. A continuación, se ha analizado el comportamiento de cada uno de los fluidos confinados en un poro de anchura variable formado por dos paredes plano paralelas, considerando tanto los casos de pared interaccionante como completamente rígida. Finalmente, gracias a la previa obtención del diagrama de fases global de las mezclas binarias y ternaria usando la ecuación de estado molecular SAFT-VR [2] se ha estudiado el equilibrio entre cada par de fluidos en condiciones de baja miscibilidad, con el fin de estudiar los fenómenos de adsorción y mojado, comparando los resultados de simulación molecular con los obtenidos mediante un modelo termodinámico de medios no homogéneos, la Teoría del Gradiente combinada con la ecuación de estado SAFT-VR Mie [3,4].

1. Míguez J. M., González-Salgado D., Legido J. L., Piñeiro M. M., *J. Chem. Phys.*, **132**, 184102 (2010).
2. Míguez J. M., dos Ramos M. C., Piñeiro M. M., Blas F.J., *J. Chem. Phys. B*, **acceptado**, (2011).
3. Lafitte T., Mendiboure B., Piñeiro M. M., Bessièrès D., Miqueu C., *J. Phys. Chem. B*, **114**, 11110 (2010).
4. Miqueu C., Míguez J.M., Piñeiro M. M., Lafitte T., Mendiboure B., *J. Phys. Chem. B*, **enviado**, (2011).

Diagrama de fases de CO₂ obtenido mediante simulación molecular

G. Pérez-Sánchez¹, J.M. Míguez¹, D. González-Salgado² y M. M. Piñeiro¹

¹Departamento de Física Aplicada, Facultad de Ciencias del Mar
Campus Lagoas-Marcosende, Universidad de Vigo
36200 Vigo, España.

²Departamento de Física Aplicada, Laboratorio de Termofísica de Ourense,
Campus As Lagoas, Universidad de Vigo
32004 Ourense, España.
e-mail: gperez@uvigo.es

1. Introducción

La determinación equilibrio sólido-sólido y sólido-líquido mediante simulación molecular es en la actualidad accesible debido a los avances en el ámbito de las metodologías [1-7] y por el aumento notable de la potencia de cálculo en los últimos años. Sin embargo, hasta la fecha la mayor parte de los trabajos [2] se han centrado en modelos físicos muy simplificados (esferas duras, Lennard-Jones, etc.) y muy poco ha sido realizado para modelos de sitios con cargas, los cuales describen más adecuadamente a las sustancias moleculares. En particular, la determinación del diagrama de fases del dióxido de carbono CO₂ utilizando este tipo de modelos no ha sido abordado hasta este momento a pesar de la importancia que esta sustancia tiene desde un punto de vista medioambiental e industrial. En este trabajo se aborda el cálculo mediante simulación molecular del equilibrio sólido-líquido del dióxido de carbono para varios modelos de sitios con cargas y centros de Lennard-Jones.

2. Metodología

Se han utilizado distintos modelos que tratan de representar el comportamiento del CO₂, a saber, el modelo MSM [8-11] y algunos de sus descendientes EPM2 [12], TraPPE [13] y el recientemente propuesto por Zhan y colaboradores [14].

Para la fase sólida se ha partido de la estructura cristalina Pa3 [15], conocida como hielo seco. A través del mencionado “Einstein molecule method” [3], se obtiene la energía libre de esta fase a una temperatura de 100K y una presión de 1000MPa. A partir de este valor es posible estimar (con integración termodinámica [4]) la energía libre a lo largo de la isobara de 1000MPa. Para la fase fluida se ha hecho uso del método de integración termodinámica [4] para la determinación de la energía libre de la fase fluida, a lo largo de la misma isobara, partiendo de la condición de gas ideal (800K y 1 bar). Con todo esto, se obtiene un primer punto de coexistencia sólido-fluido a través de la igualdad de potenciales químicos. Se han seguido los mismos pasos para las isobaras de 200 Mpa y 4MPa en los modelos mencionados anteriormente. Para finalizar el estudio hemos calculado la línea de coexistencia Pa3 sólido-fluido a través del método de Gibbs-Duhem [5-7] y el punto de coexistencia obtenido a 1000 Mpa.

3. Resultados y conclusiones

En este trabajo se han comparado las líneas de coexistencia en el plano p - T obtenidos para cada modelo con datos bibliográficos, tanto experimentales como de simu-

lación. Se ha concluido que, los modelos EPM2 y TraPPE proporcionan los mejores resultados para el equilibrio sólido-líquido. Por otro lado la comparación de los resultados alcanzados en cada modelo nos permite dar una interpretación física desde un punto de vista molecular. A grandes rasgos se puede ver que la temperatura de coexistencia a una presión dada se incrementa a medida que aumenta el momento cuadrupolar de la molécula de CO_2 . También se aprecia que dicha correlación es menor a presiones bajas.

REFERENCIAS:

1. D. Frenkel and A. J. C. Ladd, *J. Chem. Phys.* **81** 3188 (1984).
2. C. Vega, E. Sanz, J. L. F. Abascal, E. G. Noya, *J. Phys. Condens. Matter* **20** 153101 (2008).
3. E. G. Noya, M. M. Conde, C. Vega, *J. Chem. Phys.* **129** 104704 (2008).
4. D. Frenkel, B. Smit, *Understanding Molecular Simulation*, Academic Press, New York 2002.
5. D. A. Kofke, *J. Chem. Phys.* **98** 4149 (1993).
6. D. A. Kofke, *Mol. Phys.* **78** 1331 (1993).
7. D. A. Kofke, *Monte Carlo Methods in Chemical Physics*, edited by D. M. Ferguson, J. L. Siepmann, and D. G. Truhlar (Wiley, New York, 1998), Vol. **105** p. 404.
8. C. S. Murthy, K. Singer, and I. R. McDonald, *Mol. Phys.* **44** 135 (1981).
9. D. Moller and J. Fischer, *Fluid Phase Equilib.* **100** 35 (1994).
10. J. Vrabec, J. Stoll, and H. Hasse, *J. Phys. Chem. B* **105** 12126 (2001).
11. C. S. Murthy, S. F. Oshea, and I. R. McDonald, *Mol. Phys.* **50** 531 (1983).
12. J. G. Harris and K. H. Yung, *J. Phys. Chem.* **99** 1202 (1995).
13. J. J. Potoff and J. I. Siepmann, *AIChE J.* **47** 1676 (2001).
14. Z. Zhang and Z. Duan, *J. Chem. Phys.*, **122** 214507 (2005).
15. H. H. Keesom and J. W. L. Kohler, *Physica* **1** 655 (1934).

Diagrama de fases de partículas con interacciones direccionales

J. Largo¹, F. Sciortino²

¹Departamento de Física Aplicada, Universidad de Cantabria; largoju@unican.es.

²Dipartimento di Fisica, Università di Roma La Sapienza

En los últimos años, los avances en el diseño y síntesis de coloides, han situado en primer plano la importancia de las inhomogeneidades y el detalle de su composición química. Esto se manifiesta en diferencias en las interacciones entre las partículas según la dirección u orientación (e incluso selectivas). Esta situación se manifiesta claramente en el caso de las proteínas donde las interacciones direccionales no pueden ser despreciadas ni promediadas en un potencial efectivo de simetría esférica.

En este trabajo presentamos un estudio mediante simulación por ordenador de un modelo muy sencillo de partículas que incorpora de forma explícita interacciones direccionales de corto alcance, el modelo de Kern-Frenkel ¹.

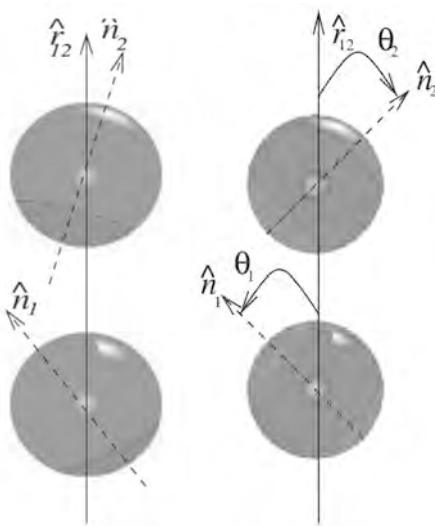


Figura 1. Representación gráfica de dos partículas que interactúan mediante un potencial del tipo Kern-Frenkel, en el ejemplo de la izquierda, la interacción atractiva está concentrada en una sola zona (parche), mientras que en el caso de la derecha la interacción atractiva se divide en dos zonas (parches).

Se ha estudiado mediante simulación por ordenador (Monte Carlo) el equilibrio de fases fluido-fluido de este tipo de partículas ^{2,3}.

Los resultados se resumen en las siguientes figuras

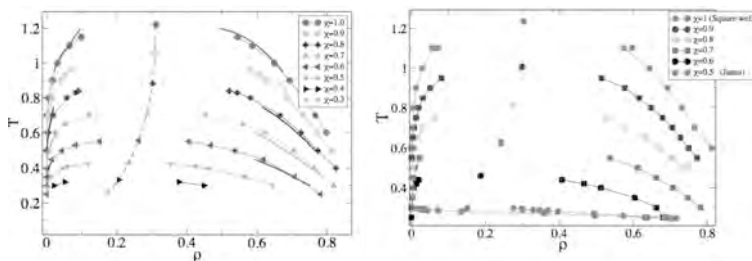


Figura 2. Equilibrio líquido-vapor obtenido mediante MonteCarlo, para el caso de partículas que interaccionan mediante una sola zona atractiva (izquierda) o mediante dos zonas atractivas (derecha). Para diferentes tamaños de superficies atractivas (X representa la proporción de superficie atractiva).

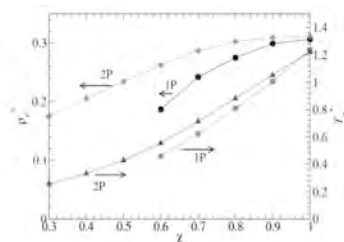


Figura 3. Localización del punto crítico del equilibrio líquido vapor, para el caso de una zona (1P) o de dos zonas atractivas (2P), para diferentes proporciones de superficie atractiva. Las unidades están reducidas en la forma habitual.

Se analiza la influencia que tiene sobre el equilibrio líquido-vapor la presencia de interacciones direccionales, considerado dos situaciones, una donde la atracción se concentra en una sola zona y otra cuando se reparte la atracción en dos zonas separadas en polos opuestos. La posición del punto crítico, a medida que se reduce la proporción de superficie atractiva, en ambos casos se traslada a temperaturas y densidades menores (dando cuenta de el menor número de enlaces), siendo más acusado el efecto en el caso de una sola superficie atractiva. Se discuten los diferentes fenómenos que aparecen.

REFERENCIAS

1. N. Kern, D. Frenkel, *J. Chem. Phys.* 118, 9882 (2003).
2. A. Giacometti, F. Lado, J. Largo, G. Pastore, F. Sciortino, *J. Chem Phys.* 131, 174114 (2009). 3. A. Giacometti, F. Lado, J. Largo, G. Pastore, F. Sciortino, *J. Chem Phys.* 132, 174110 (2010).

Agradecimientos, este trabajo ha sido financiado por el Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN) Proyecto No. FIS2009-09616.

Diagrama de Fases Isobaro del Sistema (\pm)-3,7-Dimetil-1,6-Octadien-3-ol + Etanol

S.M. García-Abarrio^{1,2}, M. Torcal^{1,2}, J.S. Urieta^{1,2}, P. Pérez¹, L. Haya^{1,2},
A.M. Mainar^{1,2}

¹Departamento de Química Física, Universidad de Zaragoza; sabarrio@unizar.es.

²División de Procesos y Reciclados, Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A), Universidad de Zaragoza; gathers@unizar.es.

Introducción

El 3,7-dimetil-1,6-octadien-3-ol, también conocido como linalool, es una sustancia que con frecuencia se encuentra como componente mayoritario de extractos o aceites de gran número de especies vegetales como el cilantro, la albahaca, la mejorana, el orégano, el romero, la salvia o el azahar entre otros. Estos extractos presentan propiedades aromatizantes muy reconocidas por las industrias farmacéutica, cosmética, alimentaria y química [1, 2].

Además de con los métodos tradicionales (hidrodestilación, arrastre de vapor, maceración, soxhlet...), el linalool puede extraerse a partir de matrices vegetales sólidas empleando CO₂ en condiciones supercríticas. Dado el carácter apolar del dióxido de carbono, suele ser frecuente la adición de pequeñas cantidades de un modificador o codisolvente, usualmente un alcohol, que consiga mejorar el rendimiento del proceso de extracción de sustancias de tipo polar.

Dada la importancia que tiene el estudio teórico-experimental de los equilibrios de fase para la optimización de procesos de extracción, concentración y posterior separación de las disoluciones etanólicas generadas en los mismos, se presenta aquí un estudio previo del equilibrio líquido-vapor (ELV) isobaro del sistema (\pm)linalool+etanol y su correlación mediante modelos de coeficiente de actividad.

Equipo y Procedimiento Experimental

En este trabajo se emplearon (\pm)linalool (98.2%) de la casa Sigma-Aldrich y etanol (99.9%) de Scharlau. El equilibrio líquido-vapor isobaro se determinó experimentalmente mediante un ebulómetro de recirculación Fisher (Figura 1) a 200, 300 y 400 mmHg. La incertidumbre en la presión fue de ± 0.05 kPa. Las temperaturas de equilibrio se obtuvieron con una sonda Pt-100 ($u_T = \pm 0.2$ K). La composición de las fases se determinó mediante medidas de densidad a 298.15 K empleando un densímetro Anton-Paar DMA 5000 ($u_\rho = \pm 0.01$ kg·m⁻³). La incertidumbre en la determinación de la composición de las fases fue de ± 0.0005 .



Figura 1. Ebulómetro de recirculación Fisher-Pilodist (VLE 100)

Cálculos y Resultados

Una vez conocidas las composiciones y temperaturas de equilibrio a presión constante, los coeficientes de actividad (γ_i) pueden calcularse fácilmente. En los cálculos se asumió que la fase vapor quedaba bien descrita mediante la ecuación del virial truncada en el segundo término. Los segundos coeficientes del virial de los componentes puros y los coeficientes cruzados fueron calculados siguiendo la correlación de Tsonopoulos [3, 4]. Los coeficientes de actividad calculados fueron reducidos con tres modelos de coeficientes de actividad, Wilson [5], NRTL [6] y UNI-QUAC [7] y la consistencia termodinámica de los mismos comprobada mediante el método de van Ness descrito por Fredenslund et al. [8].

La figura 2 muestra los diagramas de ebullición del sistema (\pm)linalool+etanol a las condiciones de presión seleccionadas junto con las líneas de correlación obtenidas para el modelo NRTL.

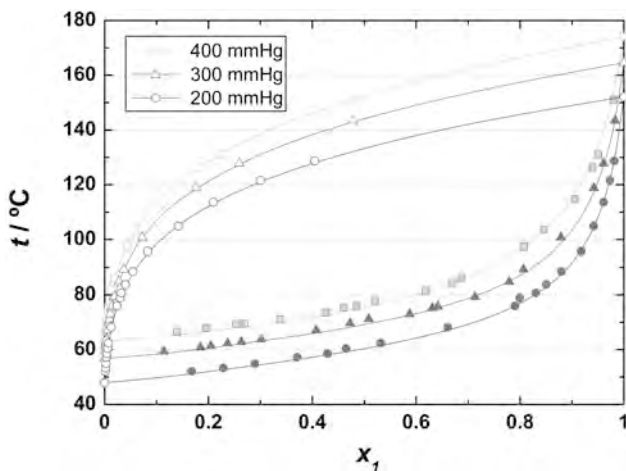


Figura 2. Diagramas de destilación del sistema (\pm)linalool(1)+etanol(2). Puntos: datos experimentales. Línea sólida: ecuación NRTL

Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo económico del MICINN-FEDER (CTQ2009-14629-C02-02), de la Diputación General de Aragón (GA-LC-042/2010 La Caixa) y del Departamento de Ciencia, Tecnología y Universidad del Gobierno de Aragón-Fondo Social Europeo (Grupo E52). SMGA agradece al Grupo GATHERS la concesión de una beca de investigación predoctoral.

REFERENCIAS

1. Lawless, J. (1995). Aceites Esenciales para Aromaterapia, Susaeta S.A.
2. O'Neil, M.J., Smith, A., Heckelman, P.E. (2001). The Merk index, 13th Edition, Merk Co.
3. Tsonopoulos, C. *AIChE J.* **20**, 263-272 (1974)
4. Tsonopoulos, C., Dymond, J.H., *Fluid Phase Equilibria* **133**, 11-34 (1997)
5. Wilson, G.M., *J. Am. Chem. Soc.*, **86**, 127-130 (1964)
6. Renon, H., Prausnitz, J. M., *AIChE J.*, **14**, 135-144 (1968)
7. Abrams, D.S., Prausnitz, J.M., *AIChE J.*, **21**, 116-128 (1975)
8. Fredenslund, A., Gmehling, J., Rasmussen, P. (1977). Vapor-Liquid Equilibria Using UNIFAC. Elsevier.

Digestión anaerobia en continuo de residuos de la industria del tomate y residuos de matadero

F. Cuadros¹, A. González¹, M.J. Roldán¹, F. Rubiales¹, A. Ruiz², F. López³

¹Departamento de Física Aplicada, Universidad de Extremadura; almudenagg@unex.es

²Área de Máquinas y Motores Térmicos, Universidad de Extremadura; aruiz@unex.es

³Departamento de Expresión Gráfica, Universidad de Extremadura, ferlopez@unex.es

Las industrias cárnicas y de procesado de tomate tienen un gran peso en la economía de Extremadura, además de generar grandes cantidades de residuos con un elevado contenido en materia orgánica y en humedad, que son altamente contaminantes y deben ser tratados, de forma adecuada, antes de su vertido en el medio para así evitar problemas de contaminación en aguas, suelos y atmósfera.

Debido a las características físico-químicas de los residuos en estudio, consideramos que la digestión anaerobia (DA) es la técnica más adecuada para su tratamiento, ya que no sólo permite eliminar parte de la carga orgánica del residuo sino que esta materia orgánica degradada se transforma en un efluente digerido que puede utilizarse como enmienda orgánica y en un gas, biogás, con alto contenido en metano que puede ser utilizado como combustible para la generación de calor y/o electricidad [1].

Nuestro grupo de investigación ya ha realizado anteriormente estudios de viabilidad económica y energética de los residuos procedentes de mataderos [2], sin embargo en este trabajo nos centramos en el estudio comparativo de los resultados obtenidos al degradar anaeróbicamente residuos de matadero de porcino y residuos de la industria del tomate de forma aislada utilizando el mismo dispositivo experimental, un reactor continuo de mezcla perfecta (Ver Figura 1). El objetivo de las experiencias realizadas es determinar la influencia del sustrato en las producciones de biogás, en el grado de degradación obtenido así como en el caudal de residuo que se puede alimentar sin llegar a la inhibición del proceso.

Los sustratos utilizados en las experiencias de DA se prepararon mezclando los residuos generados en cada industria, en las proporciones en las que se producen en una planta real, de esta forma, es posible extrapolar los resultados obtenidos a una posible planta piloto pre-industrial. Se sabe que el procesado de una tonelada de tomate genera 0,04 toneladas de pieles y semillas y 0,016 toneladas de fango procedente de la depuración del agua utilizada en el proceso, debido a que el contenido en humedad de estos residuos

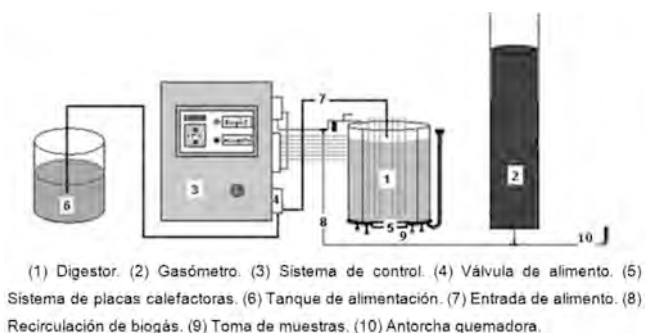


Figura 1. Esquema de digestor anaerobio continuo.

sólidos es insuficiente para tratarlos mediante DA estos residuos sólidos corresponden al 10% del sustrato a degradar, siendo un 90% agua. Por su parte, los residuos de ma-

tadero están formados por un 1% de sangre, un 6% de residuos sólidos y un 93% de aguas de lavado.

En la Tabla 1 se muestran los resultados obtenidos al degradar anaeróbicamente en un reactor continuo de mezcla perfecta residuos de matadero y residuos de la industria del tomate de forma separada.

	Residuos de matadero	Residuos de la industria del tomate
TRH	24	10
Reducción DQO total (%)	69,95	58,17
m ³ biogás/m ³ sustrato día	22,53	5,45

Tabla 1. Resultados experimentales de la digestión anaerobia de residuos de matadero y tomate en modo continuo.

Los resultados obtenidos indican que al degradar residuos de tomate es posible introducir un mayor caudal de sustrato, lo cual permite disminuir el Tiempo de Residencia Hidráulico (TRH), es decir, el tiempo que cierta cantidad de sustrato debe mantenerse en el interior del reactor para alcanzar el mayor grado de degradación posible. Sin embargo, se consiguen menores producciones de biogás y menores porcentajes de degradación. Los residuos de matadero al presentar una mayor concentración de materia orgánica permiten obtener mayores producción de biogás y mayores porcentajes de degradación, pero se puede alimentar una menor cantidad de sustrato, aumentando así el TRH del residuo.

Salvando las diferencias existentes entre los sustratos en estudio, se puede afirmar que ambos pueden ser degradados mediante digestión anaerobia obteniendo buenos resultados en lo que respecta a la producción de biogás y al grado de descontaminación obtenida.

REFERENCIAS

1. IDAE, BESEL S.A. (2007). Biomasa: Digestores anaerobios. IDAE.
2. Cuadros F., López F., Ruiz A., Rubiales F., González A., *Resources, Conservation and Recycling*, **55** (4), 393-399 (2011)

Diseño de un sistema termostático de un calorímetro isotérmico

F. Garcés-Navarro, J. L. Legido*, M. M. Mato, J. García

Departamento de Física Aplicada, Edificio de Ciencias Experimentales, Universidad de Vigo, E-36310 Vigo, España

1. Introducción

La calorimetría es una técnica experimental, relativamente antigua, que permite determinar el valor de la energía puesta en juego como consecuencia de un proceso. Calvet [1] construyó el primer calorímetro que usa termopilas para medir el flujo térmico. Un calorímetro está formado por el recipiente calorimétrico en el que se realiza el proceso y el termostato que lo rodea. En este trabajo se ha diseñado el sistema termostático para un calorímetro isotérmico que consta de una termopila para medir en un rango de temperatura desde -40°C hasta 150°C con una resolución de $1\mu\text{W}$. La celda de medida tiene un volumen de 10 ml.

2. Diseño del sistema termostático

Partiendo del calorímetro desarrollado por Calvet [1] y construido por la profesora María Inmaculada Paz Andrade [2], caracterizado por disponer de dos células gemelas, que albergan sendas termopilas hemos llegado al diseño termostático mostrado en la Figura 1: una única termopila en cuyo interior se encuentra la célula de medida, estando la termopila aislada del exterior por un bloque troncocónico y por el sistema termostático que hemos diseñado. El hecho de que sólo lleve una termopila es que lo que pretendemos es medir calores elevados con una precisión del 1%.

El sistema diseñado, esta formado por dos bloques de aluminio, de forma troncocónica, encajados uno dentro del otro, para garantizar una perfecta distribución de la energía. Rodeando este bloque se encuentra un depósito construido con material aislante y estanco, por el que circula el líquido que mantiene la temperatura constante. Por fuera del depósito instalamos un recipiente cilíndrico de hierro, y en su pared interior, una gruesa capa de lana de vidrio, para minimizar los intercambios de calor con el exterior. Finalmente, con un voltímetro que mide las variaciones de fuerza electromotriz que se producen en la termopila y que está conectado a un ordenador, se procesarán los datos.

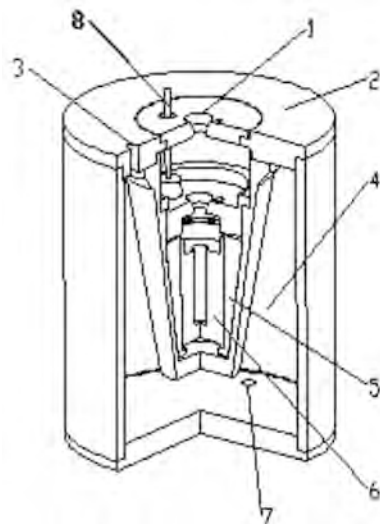


Figura 1. Sistema termostático para un calorímetro isotérmico con una sola termopila. 1. entrada de muestra; 2. recipiente cilíndrico de hierro; 3. entrada de líquido termostático; 4. depósito aislante y estanco, por el que circula el líquido; 5. bloque troncocónico; 6. célula de medida; 7. salida de líquido termostático; 8. termómetro para el control de temperatura dentro del bloque troncocónico.

Las ventajas de cotar con una sola termopila es que reducimos el tamaño y peso del dispositivo. La fabricación de la pieza troncocónica, el depósito de material aislante y estanco y el recipiente cilíndrico de hierro han sido construidos por la empresa MECANIZADOS OGAL S.L. (ogal@mundo-r.com), una vez facilitado el diseño y materiales.

3. Calibración del equipo y adquisición de datos

El calibrado del equipo es de tipo eléctrico midiendo el calor producido por efecto Joule usando un generador EJP 30 de la casa SETARAM, Lyon, (Francia) que suministra una intensidad constante que mantenemos hasta alcanzar las condiciones de régimen permanente de flujo. La constante de calibrado se determina a partir de la potencia generada en la célula y la fuerza electromotriz máxima medida con un multímetro digital conectado al calorímetro.

Este trabajo se realizó como trabajo tutelado fin de máster perteneciente al máster de Física Aplicada Interuniversitario entre la Universidad de Vigo y A Coruña (<http://webs.uvigo.es/posgraofisicaaplicada/>).

REFERENCIAS

1. Calvet, E. (1962). Experimental Thermochemistry: recent Progress in Microcalorimetry. Editorial Interscience Publishers. Vol. II, Chap. 17.
2. Paz-Andrade, M. I. (1967). Les Développements Récents de la Microcalorimétrie et de la Thermogenese. Editorial París: CNRS

Efectos de memoria de temperatura en aleaciones de Cu-Al-Ni

I. Ruiz-Larrea¹, M. L. Nó¹, A. López-Echarri², J. Rodríguez-Aseguinolaza², and J. San Juan²

¹Departamento de Física Aplicada II, Facultad de Ciencia y Tecnología, Universidad del País Vasco; Apdo.644, 48080 Bilbao, Spain. <isabel.ruiz@ehu.es>

²Departamento de Física de la Materia Condensada, Facultad de Ciencia y Tecnología, Universidad del País Vasco; Apdo.644, 48080 Bilbao, Spain.

Se ha estudiado el llamado “efecto de memoria de temperatura” (TME: “temperature memory effect”) en muestras en polvo y en monocristales de aleaciones de memoria de forma de la familia Cu-Al-Ni. Este efecto se caracteriza por el desplazamiento de la transformación martensítica hacia altas temperaturas como consecuencia de una o varias transformaciones parciales previas, desde la fase martensítica hasta una temperatura T_a (“arrested temperature”) [1]. Este estudio comparativo ha permitido determinar la influencia del tamaño de los cristales en estos efectos térmicos, previstos en la modelización del fenómeno [2]. El modelo propuesto a partir de las medidas experimentales de la energía libre en ambas fases, presupone la existencia en la fase

martensítica de una distribución continua de energías elásticas, cuya relajación, proporcionada por los ciclos de calentamiento parciales, explica el retraso de la transformación. Para ello se necesita un elevado número de plaquetas, que permita una distribución continua de energías elásticas, con independencia de sus propiedades estructurales. Así se explica la presencia de este efecto en la transformación β (austenita cúbica) \rightarrow γ' (martensita ortorrómbica) en las muestras en polvo, cuyo pequeño tamaño impide la presencia de pocas y grandes plaquetas como en el caso del monocristal, en el que este efecto no aparece [3]. El correcto análisis

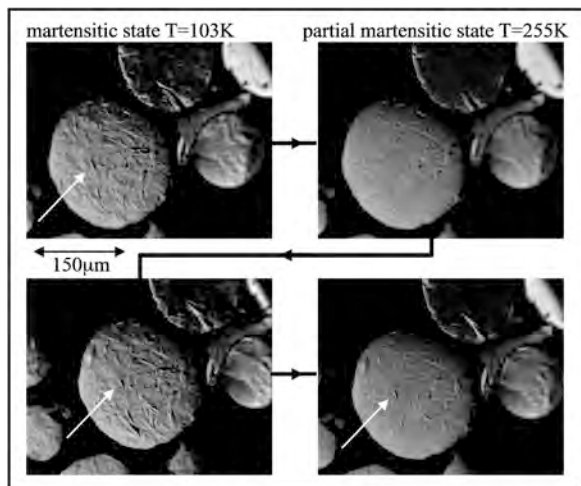


Figura 1. Observaciones ópticas del retraso de la transformación asociado al TME para muestras en polvo. Las flechas indican plaquetas de martensita que han transformado en el primer calentamiento a 255K pero que permanecen sin transformar en el segundo.

e interpretación de estos fenómenos es también importante desde el punto de vista tecnológico porque ofrece expresiones predictivas de la cinética de la transformación martensítica en ciclos de transformación parcial, lo que puede ser relevante en determinadas condiciones de trabajo.

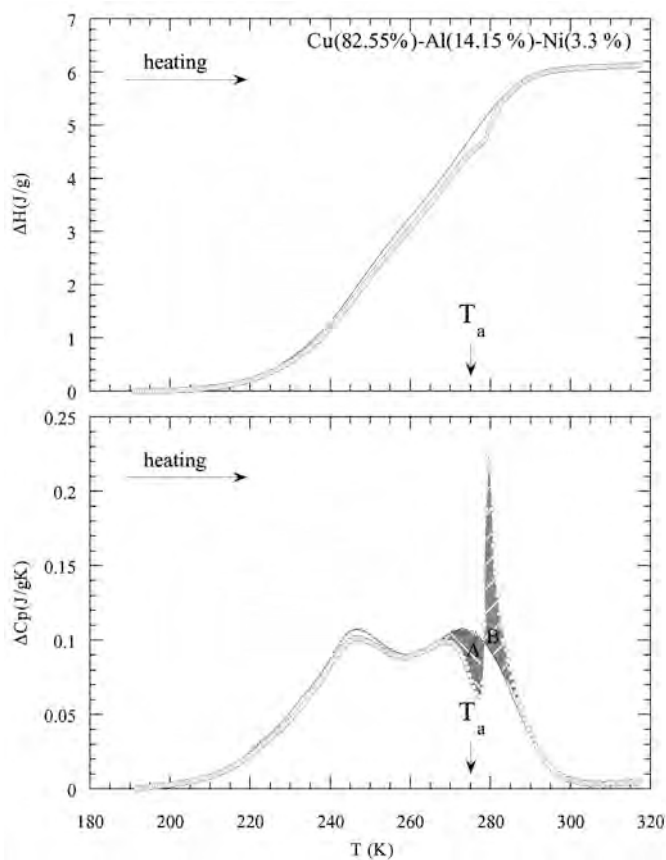


Figura 2. Retraso de la transformación $\gamma' \rightarrow \beta$ estudiado por Calorimetría Adiabática en muestras en polvo. Las áreas A y B son iguales.

REFERENCIAS

1. Airoidi G., Corsi A., Riva G., *Materials Science and Engineering A*, **241**, 233-240 (1998)
2. Rodríguez-Aseguinolaza J., Ruiz-Larrea I., Nó M.L., López-Echarri A., San Juan J., *Journal of Applied Physics*, **107**, 83518-83527 (2010)
3. Rodríguez-Aseguinolaza J., Ruiz-Larrea I., Nó M.L., López-Echarri A., Bocanegra E.H., San Juan J., *Intermetallics*, **18**, 2183-2190 (2010)

ELV isotérmico del sistema binario 1-propanol + 1,8-cineol entre 278,15 k y 323,15 k

Beatriz Gimeno^a, Ana M. Mainar^a, José S. Urieta^a, Pascual Pérez^a

^a Departamento de Química Física, Universidad de Zaragoza, Pza. S. Francisco s.n. 50009 Zaragoza, e-mail: pascual@unizar.es

Introducción

Se han medido las presiones de vapor del sistema 1-propanol + 1,8-cineol a diez temperaturas entre 278,15 y 323,15 K por el método estático. El 1,8-cineol es un terpenoide habitual en aceites esenciales y el 1-propanol puede ser empleado como modificador de polaridad en procesos de extracción con CO₂ en condiciones supercríticas, de ahí el posible interés por el conocimiento de las propiedades termofísicas de este tipo de sistemas.

Aparato y procedimiento

El aparato para medir las presiones de vapor consiste en una estructura mixta de vidrio y acero inoxidable[1]. La presión se mide mediante un juego de tres manómetros de capacitancia Barocell de Edwards de rangos 0-10, 0-100 y 0-1000 torr (Fig.1). Para prevenir el efecto de condensación sobre los manómetros se calientan mediante una resistencia interna a una temperatura superior a la del líquido. Cada líquido fue desgasificado mediante agitación magnética bajo su propia presión de vapor y ambos fueron añadidos sucesivamente, por gravedad, a la célula de medida que estaba sumergida en nitrógeno líquido.



Fig. 1

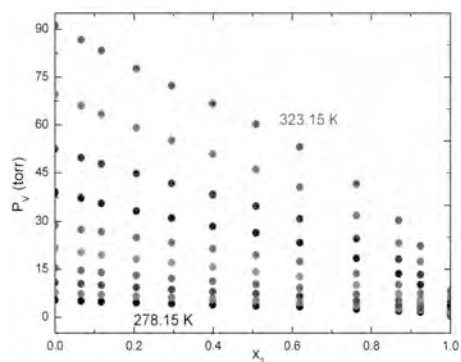


Fig. 2

Los datos de presión de vapor de los líquidos puros, entre 278.15 y 323.15 K se han ajustado a una ecuación de Antoine.

En la Fig. 2 aparecen los valores experimentales de la presión de vapor frente a la composición del líquido a las distintas temperaturas estudiadas. La energía libre de

Gibbs molar de exceso se ha obtenido mediante el método de Barker [2] utilizando el modelo de Wilson [3], donde los coeficientes de actividad vienen dados por:

$$\ln \gamma_1 = -\ln(x_1 + \Lambda_{12}x_2) + x_2 \left[\frac{\Lambda_{12}}{x_1 + \Lambda_{12}x_2} - \frac{\Lambda_{21}}{\Lambda_{21}x_1 + x_2} \right] \quad (1)$$

$$\ln \gamma_2 = -\ln(x_2 + \Lambda_{21}x_1) - x_1 \left[\frac{\Lambda_{12}}{x_1 + \Lambda_{12}x_2} - \frac{\Lambda_{21}}{\Lambda_{21}x_1 + x_2} \right] \quad (2)$$

En ausencia de valores independientes de los coeficientes de actividad, no se puede utilizar la ecuación de Gibbs-Duhem para ensayar la consistencia termodinámica de las medidas de presión de vapor. Sin embargo es posible comprobar la consistencia de los valores independientes de las entalpías y energías libres por medio de la ecuación de Gibbs-Helmholtz. Fijando $G_m^E(x)/T$, a fracciones molares redondeadas, a un polinomio de segundo grado en $1/T$, la derivada da directamente $H_m^E(x)$

Agradecimientos. Los autores desean agradecer el apoyo económico del MICINN-FEDER (Project CTQ2009-14629-C02-02) del Gobierno de Aragón (Grupo E52).

REFERENCIAS

- [1] Garcia, J. I, García-Marín, H., Mayoral, J. A., Pérez P. Green solvents from glycerol. Synthesis and physico-chemical properties of alkyl glycerol ethers, *Green Chem.*, 2010, 12, 426-434.
- [2] Barker, J. A. Determination of Activity Coefficients from Total Pressure Measurements, *Aust. J. Chem.* 1953, 6, 207-210
- [3] Wilson, G. M. A New Expression for the Excess Free Energy of Mixing, *J. Am. Chem. Soc.* 1964, 86, 127-130

Entalpías de Mezcla de (\pm) 2,6-dimetil-2,7-octadien-6-ol + Alcanoles en el intervalo (283.15-328.15) K

J.I. Pardo^{1,2}, S.M. García-Abarrio^{1,2}, J.S. Urieta^{1,2}, Ana M. Mainar^{1,2}

¹Departamento de Química Física, Universidad de Zaragoza; jupardo@unizar.es.

²División de Procesos y Reciclados, Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A), Universidad de Zaragoza; gathers@unizar.es.

Introducción

El estudio de las propiedades termofísicas de mezclas de un compuesto presente en aceites esenciales de plantas con un alcohol es importante de cara al diseño de instalaciones y procesos de extracción de dichos aceites esenciales con CO₂ supercrítico. Esto es debido a que diversos alcoholes, especialmente etanol y 1-propanol [1], se emplean como modificadores del CO₂ para mejorar la extracción de compuestos polares.

En este trabajo se han medido las entalpías molares de exceso de mezclas líquidas binarias de (\pm) 2,6-dimetil-2,7-octadien-6-ol (linalool) con etanol, 1-propanol, 2-propanol y 1-butanol a las temperaturas de 283,15, 298,15, 313,15 y 328,15 K y presión atmosférica en todo el rango de composiciones. El linalool es un monoterpeno que aparece como componente principal de varios aceites esenciales.

Método experimental

Los compuestos empleados fueron (\pm)-linalool (pureza 98,1 %), 1-propanol (pureza 99,9 %), y 1-butanol (pureza superior al 99,8 %) de la casa Aldrich así como etanol y 2-propanol (ambos de pureza 99,9 %) suministrados por la casa Scharlab.

Las entalpías molares de exceso se determinaron con ayuda de un calorímetro de flujo constante TAM (Thermal Activity Monitor) 2277 de la casa Thermometrics. Se ha operado en condiciones isotérmicas, manteniéndose la temperatura con una precisión de $\pm 0,0002$ K. La precisión en los valores de las fracciones molares se estima en ± 0.001 . Una descripción detallada del procedimiento se puede encontrar en el trabajo de Langa et al. [2].

Resultados y discusión

Las entalpías molares de exceso son negativas para las mezclas de (\pm)-linalool con etanol, 1-propanol a todas las temperaturas y con 1-butanol a las dos temperaturas más elevadas. En los demás casos existe un cambio de signo apareciendo valores positivos para fracciones molares elevadas de linalool salvo en la mezcla de (\pm)-linalool con 2-propanol a 323,15 K que exhibe valores negativos sólo a composiciones cercanas al alcohol puro. En la Figura 1 se muestran los resultados obtenidos para dos de las mezclas estudiadas.

Las entalpías molares de exceso aumentan de acuerdo con la serie: etanol < 1-propanol < 1-butanol < 2-propanol a todas las temperaturas excepto 283,15 K donde los dos últimos alcoholes intercambian sus posiciones.

La preponderancia de los valores negativos indica que la ruptura de los enlaces por puente de hidrógeno en los alcoholes y en el linalool se ve más que compensada por la formación de nuevos enlaces del mismo tipo entre las moléculas del alcohol y del

linalool, excepto en el caso de 2-propanol. Esta hipótesis fue avanzada en un trabajo [3,4] acerca de los volúmenes molares de exceso de estas mismas mezclas y queda ahora plenamente corroborada. Se observa que el tamaño y la forma de la molécula de alcohol afecta a entalpía de exceso porque la mejor acomodación de las moléculas de alcohol entre las moléculas de linalool permite la formación de más enlaces por puente de hidrógeno entre el alcohol y el monoterpeno.

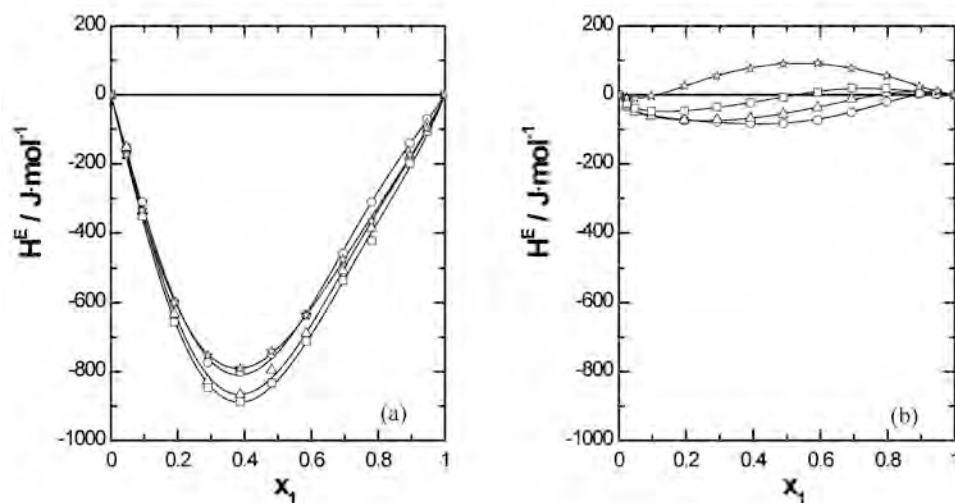


Figura 1. Entalpías molares de exceso para las mezclas binarias (±)-linalool (1)+ (a) etanol (2) o (b) 2-propanol (2) a las temperaturas: (○) 283,15 K, (△) 298,15 K, (□) 313,15 K y (☆) 328,15 K.

Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo económico del MICINN-FEDER (CTQ2009-14629-C02-02), de la Diputación General de Aragón (GA-LC-042/2010 La Caixa) y del Departamento de Ciencia, Tecnología y Universidad del Gobierno de Aragón-Fondo Social Europeo (Grupo E52). SMGA agradece al Grupo GATHERS la concesión de una beca de investigación predoctoral.

REFERENCIAS

1. Taylor, L. T. (1996). *Supercritical Fluid Extraction*. John Wiley&Sons: New York.
2. Langa, E.; Mainar, A. M.; Pardo, J. I.; Urieta, J. S. *J. Chem. Eng. Data*, **50**, 1255-1261 (2005)
3. Torcal, M.; Teruel, M. I.; García, J.; Urieta, J. S.; Mainar, A. M. *J. Chem. Eng. Data*, **55**, 5332-5339 (2010)
4. García-Abarrio, S. M.; Torcal, M.; Haya, M. L.; Urieta, J. S.; Mainar, A. M. *J. Chem. Thermodyn.*, **43**, 527-536 (2011)

Entalpías molares de exceso de los sistemas binarios dibutil éter + isómeros del pentanol a 25°C

M. Domínguez-Pérez, J. Vila, M. Cabanas, L. Segade, O. Cabeza, E. Jiménez

Dpto. de Física, Facultade de Ciencias, Universidade da Coruña, Rua da Fraga 15008 A Coruña; ejimenez@udc.es

El objetivo de este trabajo es estudiar la influencia de la posición del grupo OH de los distintos isómeros del pentanol en la entalpía molar de exceso de los siguientes sistemas binarios: Dibutil éter (DBE) + 1-pentanol, + 2-pentanol, + 3-pentanol, + 3-metil-2-butanol, + 2-metil-1-butanol y 3-metil-1-butanol a 25°C y presión atmosférica.

Todas las mezclas estudiadas han sido preparadas por pesada empleando para tal fin una balanza Mettler AT 201 cuya precisión es de $1 \cdot 10^{-5}$ g. La realización de las medidas experimentales se llevó a cabo empleando un microcalorímetro Calvet conectado a un voltímetro Philips PM 2535. Las medidas obtenidas para la entalpía molar de exceso poseen una desviación que se estima menor del 1%. Los detalles del procedimiento seguido fueron descritos previamente por Paz Andrade et al. [1, 2].

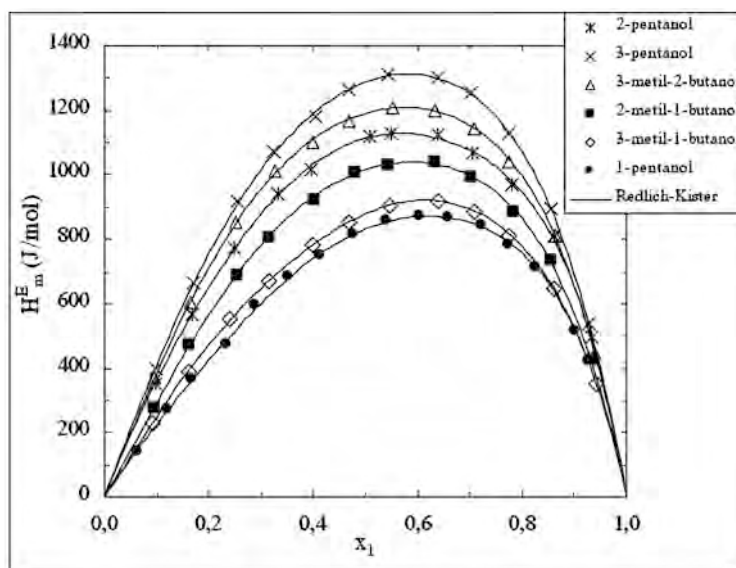


Figura 1. Resultados experimentales de la entalpía molar de exceso de los sistemas DBE + isómeros del pentanol y ajuste Redlich-Kister a 25°C

El ajuste de los valores experimentales obtenidos para la entalpía molar de exceso, H_m^E , se realizó empleando para ello dos ecuaciones polinómicas. La primera de ellas es la propuesta por Redlich-Kister [3]:

$$H_m^E = x_1 x_2 \sum_{K=0}^m A_K (x_1 - x_2)^K \quad (1)$$

en donde x_1 representa la fracción molar del DBE, x_2 es la fracción molar del correspondiente alanol y A_k son los coeficientes obtenidos por correlación de los datos experimentales mediante el uso del método de los mínimos cuadrados. Se ha empleado el criterio estadístico del test-F para determinar el número de parámetros necesarios que está comprendido entre 4 y 5.

La otra ecuación de ajuste empleada es la de Cabeza-Freire [4], que a diferencia de la expresión anterior que necesita desde 2 hasta 6 parámetros para optimizar el ajuste, esta únicamente emplea dos parámetros libres. Puede escribirse como:

$$H_m^E = x_1(1 - x_1)^n K \quad (2)$$

donde n y K son los parámetros de ajuste. Dicha expresión permite ajustar datos que generen tanto curvas simétricas como asimétricas. Para hallar la posición del máximo derivamos la función anterior respecto a x_1 e igualamos a 0, obteniendo de esta manera el valor de x_1 donde aparece el extremal (máximo o mínimo) de la curva:

$$x_1 = \frac{1}{n + 1} \quad (3)$$

Por tanto la posición del extremal fijará el valor del exponente n . Así, si la curva de exceso es simétrica (con el máximo en $x_1 = 0,5$) el valor de n será 1. Si el extremal se desplaza hacia concentraciones ricas en componente 1 (a la derecha en la gráfica), el valor de n es mayor de 1, mientras que si se desplaza hacia el lado contrario entonces n es menor de 1. Por otro lado, el valor de K es proporcional al valor absoluto del máximo de la curva, y su signo coincide con el de los valores de H_m^E , de tal forma que en una curva simétrica ($n = 1$) el valor de K será cuatro veces el extremal de la curva de exceso y respetando su signo.

En la Figura 1 se presentan los resultados experimentales obtenidos junto con el ajuste polinómico de Redlich-Kister, puesto que los obtenidos con la expresión de Cabeza-Freire son prácticamente iguales. A la vista de los mismos, se observa que en todos los casos la H_m^E es positiva y presenta el valor máximo en el caso del sistema formado por el DBE + 3-pentanol y el valor más pequeño para el DBE + 1-pentanol. Podemos concluir, que aquellos isómeros del pentanol lineales donde el grupo -OH está situado en el extremo de la cadena, caso del 1-pentanol, poseen una menor H_m^E frente al caso del 3-pentanol donde el grupo -OH se encontraría en el carbono central de la molécula y poseería la mayor H_m^E . En el caso de los isómeros ramificados siguen un comportamiento similar al descrito previamente para los isómeros lineales primando la influencia de la posición que ocupe en la molécula el grupo-OH y en segundo orden la posición del grupo metilo en la misma.

REFERENCIAS

1. Paz Andrade, M. I., Castromil, S., Baluja, M. C., *J. Chem. Thermodyn.*, **2**, 775 (1970).
2. Paz Andrade, M. I. (1967). Les Développements récents de la Microcalorimétrie et de la Thermogénese. C. N. R. S.
3. Redlich, O., Kister, A. T., *Ind. Eng. Chem.* **40**, 341 (1948).
4. Cabeza, O., Freire, S., Domínguez-Pérez, M., Segade, L., Jiménez, E., XXXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física, 345 (2007).

Estimación de la reflectividad hemisférica del terreno a partir de medidas locales de radiación solar

R. Enríquez¹, L. Zarzalejo², M.J. Jiménez¹, M.R. Heras¹

¹Unidad de Investigación sobre Eficiencia Energética en la Edificación, División de Energías Renovables, CIEMAT. ricardo.enriquez@ciemat.es.

²Unidad de Medida y caracterización de la Radiación Solar, División de Energías Renovables, CIEMAT.

La radiación solar incidente sobre una superficie inclinada arbitraria es un dato necesario tanto para el diseño como para la posterior evaluación de cualquier aplicación relacionada con la energía solar (Arquitectura bioclimática, producción fotovoltaica, energía solar térmica de baja, media o alta temperatura). Los modelos para su estimación requieren del conocimiento de la reflectividad hemisférica del terreno (Hay, 1993), parámetro físico que depende de las características propias de cada localidad.

La influencia de este parámetro es reconocida en la mayoría de las aplicaciones de la energía solar y en particular en el contexto de la evaluación energética de las edificaciones (Enríquez, 2010). Por otra parte, se reconoce una cierta carencia de bases de datos precisos a las que acudir (Muneer, 2004), convirtiéndose en una práctica habitual acudir a datos tabulados en la literatura en función del tipo de terreno en el que se pretende evaluar el recurso solar. Estos valores pueden resultar de poca utilidad en el caso de reflectividades con variaciones estacionales (debido, por ejemplo, a la cobertura vegetal o de nieve) o en entornos urbanos (con una gran variabilidad local urbanística).

El dispositivo experimental empleado para su evaluación se denomina albedómetro, que consiste en dos piranómetros en horizontal, uno de ellos orientado hacia la bóveda celeste y el otro hacia el terreno. Asimismo, el albedo (término empleado habitualmente como sinónimo de la reflectividad hemisférica del terreno) también se puede estimar a través de la teledetección por satélite (en versiones tanto geoestacionarias como polares). En entornos urbanos, no obstante, es difícil la instalación de un número suficiente de albedómetros y en la actualidad los satélites no alcanzan la resolución adecuada para una estimación precisa del albedo local.

En este trabajo se estima la reflectividad hemisférica local del terreno a partir de medidas de radiación solar global sobre dos inclinaciones típicas en una edificación: la horizontal y la vertical orientada a sur. Dicha estimación se realiza en un terreno semidesértico (Plataforma Solar de Almería) con datos de diferentes épocas del año para asegurar la validez del método. Esto permite comparar los resultados con los valores tabulados de la literatura, las estimaciones por satélite y, finalmente, con los valores medidos por un albedómetro local (figura 1).

Para dicha estimación se parte del modelo isótropo de Kondratyev, que relaciona la radiación solar global incidente sobre una superficie de inclinación β (I_β) con la radiación solar directa y global sobre la horizontal (I_b e I_g , respectivamente) y la radiación solar difusa (I_d) a través del ángulo de incidencia de la radiación solar directa sobre dicha superficie (θ_β) y la reflectividad hemisférica del terreno (ρ):

$$I_\beta = I_b \cos \theta_\beta + \frac{1}{2}(1 + \cos \beta)I_d + \frac{1}{2}\rho(1 - \cos \beta)I_g$$

Y se le añade una correlación directa-difusa a partir de un índice de claridad atmosférica determinado.

En adición, en este trabajo se muestra que si se emplean técnicas propias de la evaluación de problemas directos las estimaciones de la reflectividad son fuertemente dependientes de la serie temporal elegida, obteniéndose valores incluso fuera del rango físicamente aceptable, lo que haría sospechar de la bondad de modelo físico escogido. No obstante, si se emplean técnicas propias de la resolución de los problemas inversos (concretamente, la regularización de Tikhonov) se obtienen estimaciones más acordes con las medidas experimentales y con coherencia entre las diferentes series temporales. Este fenómeno ilustra el hecho de que antes de introducir nuevos fenómenos físicos en los modelos se ha de prestar especial atención a la verificación de las hipótesis subyacentes al método matemático de estimación empleado.

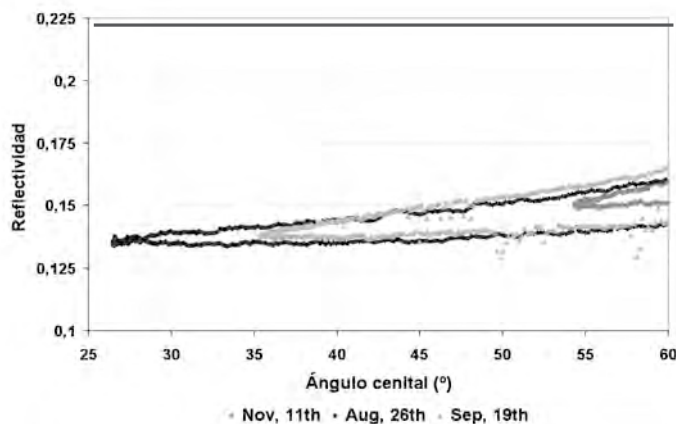


Figura 1. Medidas con albedómetro de la reflectividad del terreno de la Plataforma Solar de Almería para varios días de 2009. La línea roja muestra el valor tabulado ofrecido en la literatura.

Agradecimientos. El PSE-ARFRISOL, Referencia PS-120000-2005-1, es un Proyecto científico-tecnológico singular de carácter estratégico aceptado por el Plan Nacional de I+D+I 2004-2007, cofinanciado con Fondos FEDER y subvencionado por el Ministerio de Educación y Ciencia (MEC). Los autores agradecen esta financiación así como la colaboración a todos los miembros del Consorcio de PSE-ARFRISOL.

REFERENCIAS

- Enríquez, R. (2010), *Can general simulation models identify existing building Characteristics?*, *Esim-2010 Conference*, Winnipeg, Canadá.
Hay, J.E., *Renewable Energy*, Vol. 3, No.4/5, pp. 373-380 (1993)
Muneer, T. (2004). *Solar radiation and daylight models*. Elsevier. pp. 303-315.

Estudio de las propiedades eléctricas de membranas cargadas mediante el método de simulación por redes

A.A. Moya¹, J.A. Moleón²

¹Departamento de Física, Universidad de Jaén; aamoya@ujaen.es

²Departamento de Física, Universidad de Jaén; jamoleon@ujaen.es

El estudio de los procesos de transporte iónico a través de membranas cargadas ha experimentado un notable auge en los últimos años debido, entre otras razones, a las interesantes aplicaciones tecnológicas de estos sistemas en procesos de desalinización de agua marina o en la fabricación de electrodos selectivos de iones.

Es un hecho bien conocido que los parámetros físicos y/o químicos que describen los procesos de transporte iónico a través de sistemas de membranas cargadas pueden obtenerse mediante el análisis de la respuesta del sistema a perturbaciones eléctricas externamente aplicadas. Las investigaciones en este campo han motivado el desarrollo de diferentes técnicas experimentales basadas fundamentalmente en el análisis de la respuesta estacionaria, transitoria y de pequeña señal alterna de un sistema a una perturbación de corriente o de potencial eléctrico externamente aplicada, técnicas que han venido a sustituir o complementar a los métodos tradicionales de caracterización de sistemas electroquímicos basados en el análisis de sus respuestas a perturbaciones puramente químicas.

La caracterización de un sistema material mediante el análisis de su respuesta eléctrica, requiere el desarrollo de un modelo matemático abstracto cuya solución analítica facilite la identificación e interpretación de los datos experimentales. Para el caso de membranas cargadas, uno de los tratamientos teóricos más ampliamente utilizados es el basado en el sistema de ecuaciones de Nernst-Planck y Poisson. Sin embargo, estas ecuaciones no son lineales y su solución analítica es imposible de obtener en un gran número de situaciones físicas de interés. Esto ha motivado el que la mayor parte de los tratamientos teóricos presentados hagan uso de la hipótesis de electroneutralidad, tanto en la membrana como en los baños adyacentes a la misma, y/o asuman las relaciones de equilibrio Donnan en las interfaces disolución/membrana cargada. Aunque estas hipótesis pueden considerarse válidas en ciertas situaciones prácticas, no son necesariamente ciertas cuando una corriente eléctrica pasa a través del sistema. En este caso, los efectos de las dobles capas eléctricas que se forman en las interfaces disolución/membrana son dominantes y el problema sólo puede estudiarse numéricamente examinando la estructura de las regiones de carga espacial en dichas interfaces.

El principal objetivo de este trabajo es presentar el método de simulación por redes [1] como un método alternativo, de gran generalidad y eficacia frente a los métodos numéricos clásicos, para obtener información acerca de los procesos de transporte iónico en sistemas de membranas cargadas, incluyendo los efectos de las dobles capas eléctricas. Este método consiste básicamente en reemplazar el modelo matemático de un determinado proceso físico-químico por un modelo en red, es decir, una representación gráfica similar a los diagramas de circuitos en la teoría de redes eléctricas, y en su posterior análisis mediante la simulación del modelo en un adecuado programa de simulación de circuitos eléctricos tal como PSpice. Esta representación gráfica de los procesos que acontecen en un sistema proporciona obvias ventajas intuitivas ya que revela el papel de la topología del sistema en su comportamiento dinámico, hacién-

dose evidente la naturaleza de los distintos subsistemas que lo constituyen y el modo en el que interaccionan entre sí. Además, el modelo en red es alternativo al modelo matemático del proceso y, puesto que puede generarlo algorítmicamente, los métodos altamente avanzados del análisis de circuitos eléctricos por ordenador permiten estudiar el comportamiento dinámico de un sistema en una amplia variedad de situaciones experimentales sin tener que tratar explícitamente con las ecuaciones diferenciales que describen los procesos que acontecen en él.

La implementación en el programa PSpice del modelo en red del proceso de electrodifusión en membranas cargadas [2-3], y su simulación con los valores adecuados para los parámetros que caracterizan el sistema, nos permite investigar las propiedades del transporte iónico en sistemas de membranas cargadas, por ejemplo, mediante el análisis de las características de su respuesta a perturbaciones eléctricas externamente impuestas. En este trabajo se exploran los aspectos cuantitativos de los procesos de transporte iónico en membranas cargadas negativamente en contacto con una disolución de electrólito tipo 1:1, para dos tipos diferenciados de sistemas. El estudio se realiza mediante el análisis de las características corriente-voltaje en estado estacionario, la caracterización de sus respuestas cronopotenciométrica y cronoamperométrica, así como el análisis de su impedancia electroquímica. Los resultados obtenidos nos permiten resaltar las principales facetas del método de simulación por redes, tales como:

- Consideración de procesos de transporte iónico en regiones del espacio donde existen grandes gradientes de concentraciones iónicas molares y de potencial eléctrico (dobles capas eléctricas).
- Posibilidad de imponer condiciones externas tanto de corriente eléctrica como de potencial eléctrico.
- Análisis de datos en el dominio del tiempo y, por tanto, posibilidad de realizar análisis de respuestas estacionarias y análisis temporales de respuestas transitorias.
- Análisis de datos en el dominio de la frecuencia y, por tanto, posibilidad de realizar estudios relativos a impedancia electroquímica.

REFERENCIAS

1. Moya, A.A., Moleón, J.A., *J. Electroanal. Chem.*, **613**, 23-27 (2010)
2. Moya, A.A., *Electrochim. Acta*, **55**, 2087-2092 (2010)
3. Moya, A.A., *Electrochim. Acta*, **56**, 3015-3021 (2011)

Estudio del comportamiento térmico y reológico de peloides

CP. Gómez, MC. Domínguez, C. Medina, L. Mourelle, LM. Casás, JL. Legido

Departamento de Física Aplicada, Facultad de Ciencias, Universidad de Vigo. Campus Lagoas-Marcosende
36310 Vigo, España carmengomez@uvigo.es

1. Introducción

Los peloides son productos utilizados en terapias termales y empleados en balnearios, centros de talasoterapia y otros centros terapéuticos con propósitos tanto terapéuticos [1] como cosméticos [2]. Bajo la denominación de peloide se encuentran diferentes tipos de sedimentos o depósitos que contienen en su composición silicatos, carbonatos, sulfatos, sulfuros, etc. los cuales, mezclados con diferentes aguas mineromedicinales, procedentes del mar, o de lagos salados, forman una pasta o emplasto para usos termales. En la actualidad, muchos de los peloides usados en balnearios son derivados de diferentes arcillas.

Para la formación de un peloide se necesita un tiempo de contacto entre las fases sólidas y líquidas. El tiempo de contacto empleado en los balnearios oscila entre dos y seis meses [3]; aunque, en otros casos, puede incluso llegar hasta los dos años [4]. Sin embargo, estudios recientes han demostrado que los cambios mineralógicos y fisico-químicos se producen entre los 30-90 días, en función del agua empleada [5].

La maduración necesaria para la formación del peloide [6] es un proceso complejo en el que intervienen fenómenos físicos, químicos y biológicos. Depende por una parte del tipo de agua y de los materiales sólidos, y por otra de las proporciones utilizadas. En el proceso de maduración influyen también la temperatura, la presión, el tiempo de maduración y la forma de realizar el proceso (agitación continua, discontinua, estanqueidad). Estas variables determinarán de manera decisiva las propiedades del peloide final, y por tanto, sus propiedades terapéuticas y cosméticas.

En este trabajo se estudia el comportamiento térmico y reológico de peloides madurados con aguas mineromedicinales de Galicia. Se han estudiado la densidad, la cinética de enfriamiento y la viscosidad en función del agua mineromedicinal utilizada en el peloide y la temperatura.

2. Materiales

Para este trabajo se ha utilizado una bentonita (BENESA) y dos aguas mineromedicinales de los balnearios gallegos de Cadelas y Mondariz (Pontevedra), que poseen diferente composición y mineralización.

3. Técnicas experimentales

La preparación de las mezclas se ha llevado a cabo mediante pesada con una balanza analítica AND GR 202.

Las densidades de las aguas mineromedicinales se realizaron mediante la técnica de densimetría de oscilación mecánica (densímetro Anton Paar DMA 4500), mientras que la densidad de los peloides se ha calculado por gravimetría.

La cinética de enfriamiento se ha estudiado con un micro calorímetro Calvet.

La medida de las viscosidades de las aguas mineromedicinales se ha analizado con un viscosímetro rotacional Anton Paar AMV200 y la de los peloides mediante un reómetro Physica MCR 301.

REFERENCIAS

1. Veniale F., Bettero A., Jobstraibizer PG., Setti M. *Applied Clay Science*, **36** (1-3): 141-147 (2007)
2. Suárez M., González P., Domínguez R., Bravo A., Melian C., Pérez M., Herrera I., Blanco D., Hernández R., Fagundo JR. *Journal of alternative and complementary medicine*, **17** (2): 155-165 (2011)
3. Cozzi F., Podsiadek M., Cardinale G., Oliviero F., Dani L., Sfriso P. and Punzi L. *Joint Bone Spine*. **74**, 436-439 (2007)
4. Veniale F., Barberis E., Carcagiu G., Morandi N., Setti M., Tamanini M. and Tessier D. *Applied Clay Science*. **25**, 135-148 (2004)
5. Carretero M.I., Pozo M., Sánchez C., García F.J., Medina J.A. and Bernabé J.M. *Applied Clay Science*. **36**, 161-173 (2007)
6. Veniale F., Barberis E., Carcangiu G., Morandi N., Setti M., Tamanini M., Tessier D. *Applied Clay Science*, **25** (3-4): 135-148 (2004)

Agradecimientos. A María Perfecta Salgado González y Sofía Baz Rodríguez por su colaboración en la realización de las medidas técnicas, a la “Agrupación Estratégica de Biomedicina (INBIOMED)” financiada por la “Xunta de Galicia” y al proyecto 10 PXIB 310 153 PR financiado por la Consellería de Economía e Industria de la “Xunta de Galicia”.

Estudio Viscosimétrico de Sistemas Binarios Formamida + 1,2-Alcanodiol entre 283.15 y 313.15 K

A. El-Asmar¹, J.L. Trenzado², E. Romano³, E.C. Bentancor⁴, E. Gonzalez⁵, S. Galván⁶

¹Departamentode Física, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria; alia.el101@alu.ulpgc.es

²Departamentode Física, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria; jtrenzado@dfis.ulpgc.es

³Departamento de Química, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria; eromano@dqui.ulpgc.es

⁴Departamentode Física, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria; estefania.bentancor101@alu.ulpgc.es

⁵Departamentode Química, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria; egonzalez@dqui.ulpgc.es

⁶Departamentode Física, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria; sgalvan@dfis.ulpgc.es

Continuando con un proyecto encaminado a la determinación de propiedades termodinámicas y de transporte de sistemas formados por amidas y glicoles, se presentan aquí las desviaciones de la viscosidad, $\Delta\eta$, de los sistemas formamida + (1,2-etanodiol, 1,2-propanodiol, 1,2-butanodiol) a las temperaturas de 283.15, 293.15, 303.15 y 313.15 K. El fabricante y las purezas de los productos utilizados fueron las siguientes: formamida (Sigma-Aldrich > 99.5%), 1,2-etanodiol (Fluka > 99.5%), 1,2-propanodiol (Fluka > 99.5%) y 1,2-butanodiol (Fluka > 98.0%). Todos los líquidos fueron usados sin purificación adicional. No obstante, fueron almacenados sobre tamiz molecular (Union Carbide tipo 0.4 Å) y desgasificados antes de su uso. Las viscosidades cinemáticas ν de los líquidos puros y sus mezclas fueron determinadas, a las mismas fracciones molares a las que fueron obtenidas las densidades ρ para los sistemas binarios y condiciones estudiadas [1]. Los valores de ν fueron determinados con un sistema Schott-Geräte, incluyendo un baño termostático (CT-1450), y viscosímetros Ubbelohde previamente calibrados. El tiempo de caída del líquido por el capilar fue medido automáticamente usando dos sensores dispuestos transversalmente al viscosímetro y un reloj electrónico (AVS-350, ± 0.01 s). La incertidumbre promedio de los valores de viscosidad cinemática fue menor que el 0.4%.

A partir de los datos de ρ y ν , obtenidos a la misma composición, se obtuvieron otras propiedades como la viscosidad dinámica $\eta (= \nu\rho)$ y la desviación en la viscosidad $\Delta\eta$ definida según:

$$\Delta\eta = \eta - \sum_i x_i \eta_i \quad i = 1, 2 \quad (1)$$

donde las cantidades con subíndice se refieren a los componentes puros. Los valores de $\Delta\eta$ fueron correlacionados con la composición x_i utilizando una ecuación polinómica del tipo Redlich-Kister [2]:

$$\Delta\eta = x(1-x) \sum_{k=0}^p A_k (2x-1)^k \quad (2)$$

el grado del polinomio fue optimizado por aplicación del test-F [3]. Los resultados composición-viscosidad (cinemática o dinámica) fueron usados para probar la aplicabilidad de las ecuaciones propuestas por McAllister [4], Grunberg y Nissan [5], Heric [6], y Hind y col. [7].

Como se puede observar en la Figura 1 todas las desviaciones de la viscosidad fueron negativas en todo el intervalo de composición y temperatura. Al producirse la mezcla se interrumpen las estructuras originales de los líquidos puros, lo que podría ocasionar un decrecimiento en la viscosidad, o dicho de otra forma, con el debilitamiento de la estructura las mezclas se hacen menos viscosas. Por tanto, los valores negativos de

$\Delta\eta$ sugieren que las viscosidades de los asociados formados entre moléculas diferentes son relativamente menores que aquellos de los componentes puros.

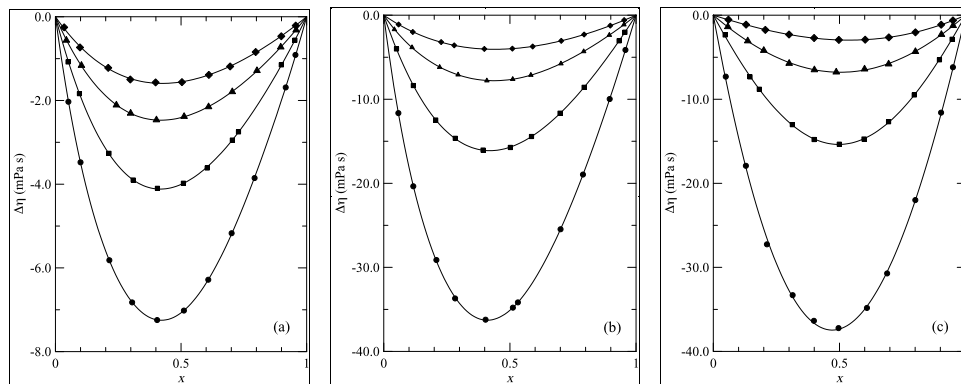


Figura 1: Desviaciones de la viscosidad de los sistemas binarios: formamida +(a) 1,2-etanodiol, (b) 1,2-propañodiol y (c) 1,2-butanodiol. Puntos experimentales: (●) 283.15 K; (■) 293.15 K; (△) 303.15 K; (◆) 313.15 K. (—) curvas de ajuste obtenidas con la ecuación (2)

Por otro lado se podría pensar que el incremento de la temperatura debería hacer menos estructuradas las mezclas, debido a la agitación térmica, provocando así una disminución de $\Delta\eta$. Sin embargo, empíricamente se observa justo lo contrario en todos los casos, esto es, que $\Delta\eta$ reduce su negatividad conforme aumenta la temperatura. Esta disminución de la desviación de la viscosidad con el aumento de la movilidad molecular evidencia que se produce un refuerzo relativo de la estructura de la mezcla al incrementarse la temperatura.

REFERENCIAS

1. Romano, E., El-Asmar, A., Betancor, E. C., Trenzado, J. L., Caro, M. N., González, E., Estudio Volumétrico de Sistemas Formamida + 1,2-Alcanodiol en un Intervalo Moderado de Temperaturas. Presentado en este Congreso
2. Redlich, O. y Kister, A.T., *Ind. Eng. Chem.*, **40**, 341-345 (1948)
3. Bevington, P., (1969). *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences*. McGraw-Hill New York
4. McAllister, R.A., *AIChE J.*, **6**, 427-431 (1960)
5. Grunberg, L. y Nissan, A.H., *Nature*, **164**, 799-800 (1949)
6. Heric, E.L., *J. Chem. Eng. Data*, **11**, 66-68 (1966)
7. Hind, R.K., McLaughlin, E. y Ubbelohde, A.R., *Trans. Faraday Soc.*, **56**, 328-334 (1960)

Estudio Volumétrico de Sistemas Formamida + 1,2-Alcanodiol en un Intervalo Moderado de Temperaturas

E. Romano¹, A. El-Asmar², E.C. Bentancor³, J.L. Trenzado⁴, M.N. Caro⁵, E. Gonzalez⁶

¹Departamento de Química, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria; eromano@dqui.ulpgc.es

²Departamentode Física, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria; alia.el101@alu.ulpgc.es

³Departamentode Física, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria; estefania.betancor101@alu.ulpgc.es

⁴Departamentode Física, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria; jtrenzado@dfis.ulpgc.es

⁵Departamentode Química, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria; mcaro@dqui.ulpgc.es

⁶Departamentode Química, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria; egonzalez@dqui.ulpgc.es

En general, las amidas son buenos disolventes de muchos compuestos orgánicos e inorgánicos y también se utilizan como plastificantes; y en particular, la formamida se utiliza como ablandador de papel y pegamentos. Sin embargo, a pesar de la importancia industrial de las amidas y también de los glicoles, la disponibilidad de propiedades termodinámicas para este tipo de sistemas en la literatura es escasa. Este trabajo pretende contribuir al aumento de las bases de datos existentes sobre estas propiedades. Aquí se han determinado de forma experimental las densidades ρ de los sistemas bicomponentes formamida + (1,2-etanodiol, 1,2-propanodiol, 1,2-butanodiol) en el intervalo de temperaturas de 283.15 a 313.15 K. Los volúmenes molares de exceso V^E han sido también obtenidos para los sistemas estudiados.

Todos los productos químicos usados en este estudio fueron secados con tamiz molecular (Union Carbide 0.4 nm de Fluka) y desgasificados por ultrasonido antes de su uso experimental. Las purezas de los compuestos, suministradas por el fabricante, eran las siguientes: formamida (>0.995, Sigma-Aldrich), 1,2-etanodiol (>0.995), Fluka), 1,2-propanodiol (>0.995, Fluka) y 1,2-butanodiol (>0.98, Fluka). Las mezclas se prepararon con una balanza de precisión (Mettler AE240, $\pm 1 \times 10^{-5}$ g), y la densidad fue medida a presión atmosférica con un densímetro de tubo vibrante Anton Paar DMA-5000. La temperatura del oscilador estuvo siempre controlada con una precisión ± 0.01 K; presentando los resultados experimentales de ρ una incertidumbre máxima de 1×10^{-5} g cm⁻³. Con los datos experimentales de la densidad a cada fracción molar y los pesos moleculares y las densidades de los líquidos puros se ha calculado el volumen molar de exceso según la expresión:

$$V^E = \left[\frac{xM_1 + (1-x)M_2}{\rho} \right] - \left[x \frac{M_1}{\rho_1} + (1-x) \frac{M_2}{\rho_2} \right] \quad (1)$$

Los valores de V^E fueron ajustados con un polinomio de tipo Redlich-Kister [1]

$$V^E = x(1-x) \sum_{k=0}^P A_k (2x-1)^k \quad (2)$$

donde los coeficientes A_k se calcularon haciendo uso del método de mínimos cuadrados y recurriendo al test-F para la selección del número óptimo de parámetros ajustables.

Las moléculas de formamida son altamente polares y están fuertemente autoasociadas a través de una extensiva red tridimensional de puentes de hidrógeno. Por su parte, las moléculas de los alcanodiolos están igualmente autoasociadas mediante el establecimiento de enlaces de hidrógeno inter- e intramoleculares. En estas mezcla se va a inducir una disociación mutua de las estructuras de puentes de H presentes en los

líquidos puros, con la subsecuente formación de nuevos puentes de H ($\text{C}=\text{O}\cdots\text{H}-\text{O}$) y del tipo ($\text{N}-\text{H}\cdots\text{H}-\text{O}$). En el caso de las mezclas formamida + etilenglicol (Fig. 1a), los valores positivos de V^E evidencian que la ruptura de las especies asociadas presentes en los líquidos puros conducen a una expansión en el volumen; mientras que en los sistemas formamida + 1,2-butanodiol (Fig. 1c) la formación de puentes de H entre los componentes de la mezcla conduce a un empaquetamiento más compacto de las moléculas que dan como resultado una contracción en el volumen de la mezcla y, por tanto, valores negativos de V^E . En general, el comportamiento volumétrico de las mezclas que contienen 1,2-propanodiol (Fig. 1b) está entre los dos descritos, esto es, a bajas concentraciones de formamida los valores negativos de V^E pueden ser atribuidos al predominio de los efectos específicos (puentes de H) y al mejor acomodamiento entre moléculas diferentes; mientras que los valores positivos de V^E a mayores concentraciones de la amida primaria pueden deberse a una inadaptación entre las moléculas que favorece la disrupción de la estructura asociada de los puros.

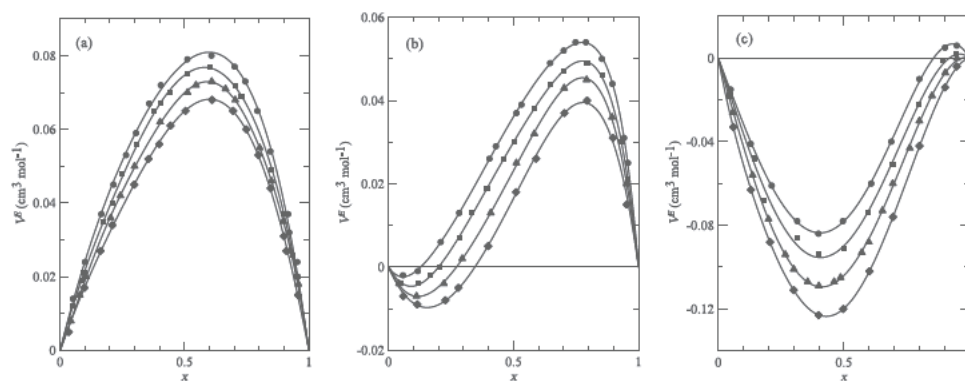


Figura 1: Volúmenes molares de exceso de los sistemas binarios formamida + (a) 1,2-etanodiol, (b) 1,2-propanodiol y (c) 1,2-butanodiol. Puntos experimentales: (●) 283.15 K; (■) 293.15 K; (▲) 303.15 K; (◆) 313.15 K. (—) curvas de ajuste obtenidas con la ecuación (2)

En cuanto a la variación con la temperatura, todos los sistemas verifican una disminución de V^E con el aumento de la temperatura. Cabe pensar que lo que en realidad ocurre para estos sistemas es que el aumento de la temperatura ocasiona una mejor acomodación de la molécula de formamida en los progresivamente mayores huecos intermoleculares del diol (efecto que se acusa más al aumentar el peso molecular del alcanodiol), lo que provoca un refuerzo relativo de las interacciones heteromoleculares; conduciendo, todo ello, a una disminución de V^E .

REFERENCIAS

1. Redlich, O. y Kister, A.T., *Ind. Eng. Chem.*, **40**, 341-345 (1948)

Estudio termofísico de mezclas de *saccorhiza*, bentonita y agua de mar

C. Fernández¹, CP. Gómez¹, L. Mourelle¹, C. Medina¹, JL. Legido¹

¹Departamento de Física Aplicada, Facultad de Ciencias, Universidad de Vigo. Campus Lagoas-Marcosende 36310 Vigo, España. crisferi@uvigo.es, carmengomez@uvigo.es, xllegido@uvigo.es, lmourelle@uvigo.es, famedina@uvigo.es.

Las mezclas de polvo de alga, arcillas y agua de mar son la base de los peloides termales usados en centros de talasoterapia para diversos usos terapéuticos. Además de estos limos marinos (peloides termales elaborados con agua de mar) también se usan en balnearios otras mezclas de algas y arcillas con aguas mineromedicinales diversas.

Los peloides termales se utilizan en centros de talasoterapia con fines terapéuticos y cosméticos. Su uso en el tratamiento de patologías reumáticas, lesiones deportivas y alteraciones dermatológicas como acné, dermatitis seborreica y psoriasis son conocidos desde la antigüedad y en la actualidad se recupera su uso como una terapia natural con escasos efectos secundarios.

La escasez de estos productos condiciona que la mayor parte sean mezclas comerciales y muy pocos de ellos naturales, existiendo escasos estudios relativos a su caracterización y composición [1,2,3,4], aunque hay algunas publicaciones relativas a sus efectos terapéuticos [5,6]. Debido al aumento de la demanda de tratamientos de estas alteraciones con derivados marinos y con aguas mineromedicinales, se hace preciso realizar estudios para el desarrollo de productos de calidad y eficacia probada para que sean considerados como un recurso terapéutico termal apropiado.

En este trabajo se va a estudiar la densidad y el comportamiento térmico de las mezclas de un polvo de alga de la especie *Saccorhiza polyschides*, una bentonita de la casa comercial BENESA y el agua de mar de Quinton.

El alga utilizada pertenece a la especie *Saccorhiza polyschides* que es muy abundante en las costas gallegas, convirtiéndose en los últimos años en una especie ciertamente invasora [7], por lo que se plantea su aprovechamiento tanto en alimentación (diversos estudios muestran su especial interés en este campo debido a su alto valor nutricional) como en talasoterapia, pudiendo utilizarse en forma de emplastos, bien sola o mezclada con arcillas para constituir peloides termales.

Las determinaciones se realizaron sobre mezclas de polvo del alga con una arcilla tipo bentonita y agua de mar, en distintas proporciones.

Para la determinación de la densidad se utilizó el picnómetro y el densímetro de oscilación mecánica Anton Paar DMA 4500. Para analizar su comportamiento térmico se determinaron el calor específico, mediante el microcalorímetro Calvet y la conductividad térmica con el equipo KD2 Pro Decagon Devices.

Agradecimientos

A María Perfecta Salgado González y Sofía Baz Rodríguez por su colaboración en la realización de las medidas técnicas, a la “Agrupación Estratégica de Biomedicina (INBIOMED)” financiada por la “Xunta de Galicia” y al proyecto 10 PXIB 310 153 PR financiado por la Consellería de Economía e Industria de la “Xunta de Galicia”.

REFERENCIAS

1. Curri, S.B., Bombardelli, E., Grossi, F. *Clinica terapeutica* **148**(12), 637-54 (1997).
2. Agostini, G., Martini, P., Agostini, S., Dellavalle, F. *Minerva Medica* **87**, 427-432 (1996).
3. Chelnokova, BI., Ivanov, EM., Shchetinin, VM., *Vopr Kurortol Fizioter Lech Fiz Kult.* **3**, 40-2 (2009).
4. Kim, JH., Lee, J., Lee, HB., Shin, JH., Kim, EK., *Nat Prod Commun* **5**(3):395-8 (2010).
5. Veinpalu, Eiu., Trink, RF., Veinpalu, LE., Pyder, KhA., *Vopr Kurortol Fizioter Lech Fiz Kult.* **5-6**:54-7 (1992).
6. Grether-Beck, S., Mühlberg, K., Brenden, H., Felsner, I., Brynjólfssdóttir, A., Einarsson, S., Krutmann, J., *Exp Dermatol.* **17**(9):771-9 (2008).
7. Olabarria, C., Lastra, M., et al., *J. Exp. Mar. Biol. Ecol.*, **358**(1):1-13 (2008).

Influencia de la asociación en las funciones respuesta de mezclas {alcohol+inerte}

P. Gómez-Álvarez*, J. M. Míguez, D. González-Salgado, L. Romaní

Departamento de Física Aplicada, Universidad de Vigo, Ourense; ga_paula@uvigo.es*

La termodinámica de mezclas líquidas donde existe agregación por puentes de hidrógeno ha sido analizada mediante la aplicación de modelos teóricos [1-3] con el fin de comprender el comportamiento de estos sistemas. Particularmente, mezclas binarias de un líquido autoasociado y un inerte, donde la formación de agregados ocurre sólo entre moléculas del mismo tipo, se ha estudiado con el modelo de asociación TSAM [4,5]. La idea base de este modelo es que sólo dos estados (el asociado y el monómero) son accesibles para las moléculas de alcohol. Así, el modelo fue capaz de describir el comportamiento de las propiedades termodinámicas de mezclas {alcohol+alcano}, excepto a bajas concentraciones de alcohol.

Recientemente, se ha desarrollado una metodología [6] para analizar efectos de asociación en las funciones respuesta de un líquido puro autoasociado mediante simulaciones de Monte Carlo. El procedimiento esencialmente consiste en expresar la energía residual y el volumen del fluido en términos de estas propiedades para dos fluidos hipotéticos formados por monómeros y moléculas asociadas, respectivamente. Esto permite escribir las derivadas segundas del potencial termodinámico de una forma perturbativa como combinación del valor de la propiedad para el fluido de monómeros y la contribución de asociación (el término perturbativo). Aquí, se extiende el método, originalmente formulado para las propiedades de líquidos puros, para la evaluación de propiedades de exceso de mezclas {alcohol+inerte}. Obviamente, en este caso, el término de referencia de una propiedad depende de su valor para el fluido de monómeros pero también del correspondiente para el líquido inerte. Se han llevado a cabo simulaciones de Monte Carlo de mezclas {metanol+inerte} a presión atmosférica y a varias temperaturas para determinar las contribuciones a la capacidad calorífica isobárica y a las derivadas del volumen respecto a la temperatura y la presión. En base a los resultados, el procedimiento permite estudiar satisfactoriamente la influencia de la asociación en el comportamiento termodinámico de estos sistemas, incluso en la región diluida de alcohol, dando una explicación sobre por qué TSAM falla. Paralelamente, se ha realizado un exhaustivo estudio de los diferentes tipos de clusters presentes en la mezcla.

1. Heintz A., *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*, **89**, 172-181 (1985).
2. Lafitte T., Piñeiro M. M., Daridon J.-L., and Bessièrès D., *J. Phys. Chem. B*, **111**, 3447-3461 (2007).
3. Medeiros M., and Téllez-Arredondo P., *Ind. Eng. Chem. Res.*, **47**, 5723-5733 (2008).
4. Cerdeiriña C. A., González-Salgado D., Romaní L., Delgado M. C., Torres L. A., and Costas M., *J. Chem. Phys.*, **120**, 6648-6659 (2004).
5. Cerdeiriña C. A., Troncoso J., González-Salgado D., García-Miaja G., Hernández-Segura G. O., Bessièrès D., Medeiros M., Romaní L., and Costas M., *J. Phys. Chem. B*, **111**, 1119-1128 (2007).
6. Gómez-Álvarez P., Dopazo-Paz A., Romaní L., and González-Salgado D., *J. Chem. Phys.*, **134**, 014512 (2011).

Influencia del disolvente y del coagulante interno en fibras huecas para destilación en membranas

L. García-Fernández, M.C. García-Payo, M. Khayet*

Departamento de Física Aplicada I, Facultad de Físicas, Universidad Complutense de Madrid, Avda. Complutense s/n 28040 Madrid; * khayetm@fis.ucm.es; Tel. 91-3945185.

La destilación en membranas (DM) está siendo uno de los métodos de separación más competitivos y punteros de la actualidad en el campo de la investigación, con diversas aplicaciones como la desalación de aguas salobres y agua de mar, purificación de aguas residuales, concentración de compuestos no-volátiles procedentes de industrias alimenticias y farmacéuticas, etc. Este estudio se basa en la posibilidad de utilizar la DM en la desalación, y su posterior aplicación en el tratamiento de aguas residuales como son los alpechines.

La DM es un proceso no-isotermo de evaporación/condensación en el cual la membrana debe ser microporosa, hidrófoba y con elevada porosidad. La fuerza motriz es una diferencia de presiones de vapor entre ambos extremos de los poros de la membrana. Debido a la ausencia de transporte líquido, se consiguen unos grados de separación muy elevados, superiores al 99% [1].

Los módulos de membranas de fibra hueca exhiben una gran área superficial de membrana por unidad de volumen con una capacidad de empaquetamiento de 500-9000 m²/m³ permitiendo una alta producción (permeado). Además, las membranas de fibra hueca no necesitan apoyo mecánico como las membranas planas, tienen una buena flexibilidad y son fáciles de montar en módulos. Estas características hacen que las membranas de fibra hueca sean atractivas desde un punto de vista industrial.

El objetivo de este trabajo es el estudio de los efectos del disolvente en la disolución polimérica y del coagulante interno sobre la morfología y características de las membranas de fibra hueca así como en su rendimiento en la desalación de aguas mediante destilación en membranas con contacto directo (DMCD). Se han fabricado membranas de fibras huecas, mediante el método rotacional de inversión de fase seco/mojada (dry/wet spinning method [2]), utilizando 19% en peso del copolímero fluoruro de polivinilideno-co-hexafluoruro de propileno (PVDF-HFP), diferentes disolventes y sus mezclas (N.N-dimetilformamida, DMF, N.N – dimetilacetamida, DMAC, y trimetilfosfato, TMP) y 5% en peso del aditivo polietilenglicol (PEG 6000 M_w). Brevemente, la disolución polimérica se introduce en un depósito a una cierta temperatura y sale a través del “spinneret” por medio de la aplicación de una presión ejercida por una bombona de nitrógeno (60 kPa). En primer lugar, se solidifica la parte interna de la fibra debido al coagulante interno que se impulsa por medio de una bomba peristáltica (19 ml/min). Se han utilizado cuatro coagulantes internos diferentes (agua destilada y mezclas acuosas de DMAC al 20, 40 y 60% en peso). La fibra hueca sale del “spinneret” situado a 27.5 cm sobre un depósito lleno de agua a 40°C. Posteriormente, la fibra es trasladada por medio de un rodillo giratorio hacia otro depósito también lleno de agua. En este último depósito, la fibra permanece durante 48 h para conseguir la solidificación total de la misma eliminando todo el disolvente de la fibra. Finalmente, se seca la fibra a temperatura ambiente antes de su caracterización.

Las fibras se han caracterizado utilizando el microscopio electrónico de barrido (SEM, JEOL JSM 6335F), se han determinado los diámetros internos y externos así

como el espesor de las fibras, la presión de entrada de agua en los poros de las fibras y la fracción de volumen vacío (porosidad). Además, se han realizado experimentos de DMCD con agua destilada y con disoluciones acuosas de NaCl al 3% en peso variando la temperatura del agua a tratar entre 60°C y 80°C y manteniendo la temperatura del permeado a 25°C. La disolución a tratar se hace circular por el interior de las fibras mientras que el permeado circula por la carcasa del módulo.

Se ha observado que el disolvente DMAC es mejor que DMF y que la cantidad de DMAC más adecuada en la mezcla DMAC/TMP es del 40% ya que se obtiene el máximo flujo de permeado (Figura 1) manteniendo el mismo factor de separación (rechazo de la sal NaCl). Al analizar el efecto del tipo de coagulante interno (disoluciones de agua destilada y DMAC en distintas proporciones), se ha observado un cambio progresivo en la morfología de la sección transversal de las membranas de fibra hueca (Figura 2) a medida que aumenta el contenido de DMAC en la mezcla. Se acentúan las estructuras alargadas con forma de “dedos” en la cara externa de la fibra y desaparecen en la cara interna proporcionando una estructura esponjosa menos compacta responsable del incremento del flujo de permeado (vea la membrana DMAC40D60). Es importante destacar que todas las membranas fabricadas exhiben un factor de separación de sal del agua superior al 99%.

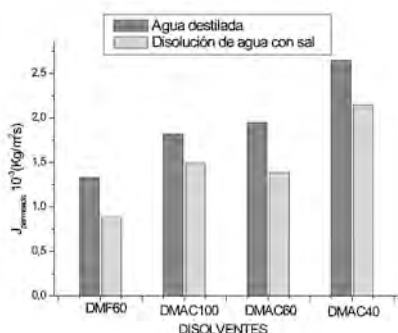


Figura 1. Flujo de permeado de las membranas fabricadas con diferentes disolventes. ($T_{cal}=80$ °C; $T_{frio}=25$ °C)

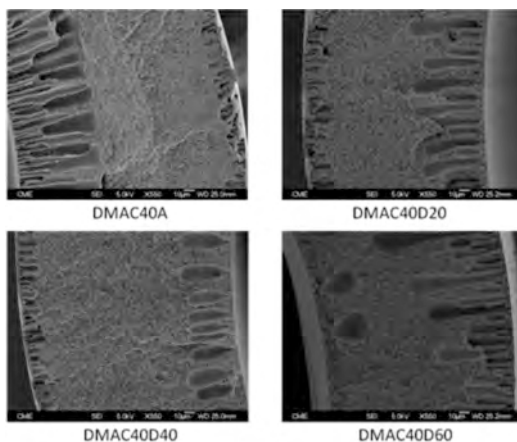


Figura 2. Imágenes SEM de la sección transversal de las membranas de fibra hueca preparadas con distintos coagulantes internos.

REFERENCIAS

1. Khayet, M., (2008) Membrane distillation, in: Li, N.N., Fane, A.G., Ho, W.S.W., Matsuuura, T. (Eds.), *Advance Membrane Technology and Applications*, John Wiley & Sons, 297-370.
2. García-Payo, M.C., Essalhi, M., Khayet, M., *Desalination*, **245**, 469-473 (2009).

Agradecimientos

Este trabajo ha sido realizado con la ayuda financiera de la Agencia Española de Cooperación Internacional y Desarrollo AECID (proyecto A/032278/10) y la ayuda a los Grupos de Investigación Santander-UCM, convocatoria GR35/10-A (Modalidad A-Consolidados, Grupo de Membranas y Energías Renovables).

Luces y sombras en la historia del principio cero de la Termodinámica

C. Fernández-Pineda, S. Velasco Maillo

Departamento de Física Aplicada I (Termología) Facultad de Ciencias Físicas UCM

Departamento de Física Aplicada Facultad de Ciencias Universidad de Salamanca

En la historia de las ideas y su formulación matemática de cualquier parte de la Física en general y de la Termodinámica en particular hay siempre algunas insuficientemente diferenciadas. En el desarrollo del principio cero hay al menos tres aspectos que requieren aclaración y corrección: 1º) la formulación matemática de la propiedad transitiva del equilibrio térmico, 2º) la definición de pared adiabática cuando hay interacción material y 3º) la fecha concreta del principio (¿1931?, ¿1939?) y 1936 (descubierta por los autores). En el presente trabajo se revisan los aspectos más destacados de los puntos señalados a la luz de las investigaciones y hallazgos realizados por los autores.

Potencial bi-iónico y Coeficientes de Difusión

José A. García-Gamuz¹, Ramón P. Valerdi-Pérez¹ y José A. Ibáñez Mengual²

¹ Dpto. Física Médica, Fac. Medicina. Campus de Espinardo. Univ. Murcia, 30071. Murcia. España

² Dto. Física, Fac. Química. Campus Espinardo. Univ. Murcia, 30071. Murcia. España.

1. Introducción

El potencial bi-iónico, $\Delta\Psi_{\text{BIP}}$, es la diferencia de potencial entre dos disoluciones electrolíticas con un simión común a la misma concentración, separadas por una membrana cargada [1]. El $\Delta\Psi_{\text{BIP}}$ es un tópico habitual en el estudio de fenómenos de transporte a través de membranas cargadas, por la importancia práctica de sistemas multi-iónicos en membranas sintéticas y por su relevancia en sistemas biológicos. Experimentalmente, el comportamiento de las membranas débilmente cargadas difiere del comportamiento de las membranas con alta densidad de carga fija [2].

El objetivo es establecer un diseño experimental que permita medir con garantías el potencial bi-iónico que se genera bajo ciertas condiciones, a través de una membrana selectiva y el estudio de las medidas de potencial bi-iónico obtenidas con relación a la temperatura a la que tiene lugar el proceso, así como respecto al cambio de concentración de las disoluciones en contacto con la membrana.

2. Modelo teórico

Se considera el transporte en la dirección x a través de la membrana que pone en contacto dos disoluciones de dos electrolitos binarios 1:1 diferentes, a la misma concentración c_0 y con el mismo anión, siendo la concentración de los grupos cargados en

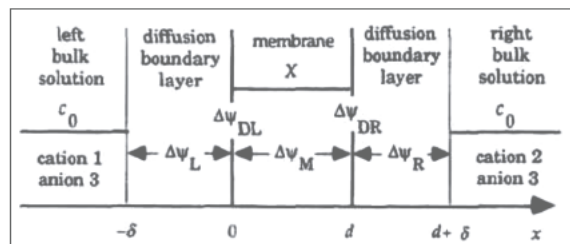


Figura 1. Esquema del sistema de membrana [3].

la membrana X (Figura 1).

Las ecuaciones que describen este problema son las de Nerst-Panck en estado estacionario, bajo las hipótesis de densidad de corriente nula y de electroneutralidad local, a través del sistema de membrana (membrana + capas límite de difusión (DBLs)). Resuelto el sistema resultante, para las condiciones de contorno establecidas:

$c_1(-\delta) = c_2(d + \delta) = c$ y $c_2(-\delta) = c_1(d + \delta) = 0$, y asumiendo, de acuerdo con las expresiones del equilibrio Donnan, la discontinuidad de la concentración y el potencial a través de las interfases sistema de membrana/capas límites de difusión. A partir de tales ecuaciones, se obtiene la solución analítica para la fase membrana:

$(J_1/\bar{D}_1) + (J_2/\bar{D}_2) + (J_3/\bar{D}_3) = -2(d\bar{c}_3/dx) - X(d\bar{\Psi}/dx)$. Los resultados son función de los coeficientes de difusión iónicos en la fase membrana,

\bar{D}_i ($i=1,2$ para los contraiones e $i=3$ para el simión) y cuya integración conduce a

$2[\bar{c}_3(d) - \bar{c}_3(0)] + X\delta\psi_{diff} + (\bar{j}_1 + \bar{j}_2 + \bar{j}_3)d = 0$, donde $\bar{j}_i \equiv \bar{J}_i/\bar{D}_i$ y $\Delta\psi_{diff} \equiv \bar{\Psi}(d) - \bar{\Psi}(0)$ es el

potencial de difusión en dicha fase. En las DBLs, la suma de las ecuaciones de Nerst-Panck lleva a que el gradiente de concentración de los similiones es constante, por lo que $c_3(0)=c_0-\frac{j_1+j_2+j_3}{2}\delta$ y $c_3(d)=c_0+\frac{j_1+j_2+j_3}{2}\delta$, siendo $j_i \equiv J_i/D_i$. La expresión para $\Delta\Psi_{diff}$ es: $\Delta\Psi_{diff} = \bar{\Gamma} \ln \frac{c_3(d)+X(1-\Gamma)/2}{c_3(0)+X(1-\Gamma)/2}$ siendo $\Delta\Psi_L = \Psi(0)-\Psi(\delta) = \Gamma \ln(c_3(0)/c)$ y $\Delta\Psi_R = \Psi(d+\delta)-\Psi(d) = \Gamma \ln(c/c_3(d))$, para las DBLs, donde $\Gamma \equiv (j_1+j_2-j_3)/(j_1+j_2+j_3)$ y $\bar{\Gamma} \equiv (\bar{j}_1+\bar{j}_2-\bar{j}_3)/(\bar{j}_1+\bar{j}_2+\bar{j}_3)$.

El potencial bi-iónico se calcula mediante la expresión:

$$\Delta\Psi_{BIP} = \Delta\Psi_L + \Delta\Psi_{DL} + \Delta\Psi_{diff} + \Delta\Psi_{DR} + \Delta\Psi_R$$

Cuando la concentración del electrolito (c_0) es suficientemente baja comparada con la concentración de cargas en la membrana (X), se puede considerar la concentración de similiones muy pequeña y la caída de potencial despreciable, obteniéndose para $\Delta\Psi_{BIP}$: $\Delta\Psi_{BIP} \approx \Delta\Psi_L + \Delta\Psi_{DL} + \Delta\Psi_{DR} + \Delta\Psi_R = (1+\Gamma) \ln(c_3(0)/c_3(d))$. Si la permeabilidad de la membrana para los similiones es muy pequeña, se sigue que $|J_3| \ll |J_1| \approx |J_2|$ y además $\Gamma \approx 1$, por lo que se obtiene para las DBLs $\Delta\Psi_L + \Delta\Psi_R = \ln(c_3(0)/c_3(d))$.

Para los contraiones, la suma de los dos potenciales Donnan es:

$$\Delta\Psi_{DL} + \Delta\Psi_{DR} = \ln \frac{c_1(0)c_1(d)}{c_1(d)c_1(0)} \approx \ln \frac{c_1(0)}{c_1(d)} \approx \ln \frac{c_2(0)}{c_2(d)}$$

Finalmente se obtiene para $\Delta\Psi_{BIP}$: $\Delta\Psi_{BIP} \approx \Delta\Psi_L + \Delta\Psi_{DL} + \Delta\Psi_{DR} + \Delta\Psi_R = \ln(D_1/D_2)$

3. Dispositivo experimental

Las medidas de potenciales biónicos requieren de un dispositivo experimental específico (Figura 2). Estos sistemas están constituidos por una membrana intercambiadora situada entre dos disoluciones que contienen un ión común [4]. En nuestro caso se ha realizado el experimento empleando sendas disoluciones acuosas de NaCl y KCl, con igual concentración, por lo que el similión es Cl^- . La membrana utilizada es polimérica entrecruzada de intercambio catiónico *Ionics*, CR61AZL (capacidad de intercambio de 2,10 meqiv/g, $1.6 \times 10^{-3} \text{ mol/cm}^3$ de grupos sulfónicos). Ambas disoluciones se colocan en sendos contenedores de vidrio termotatados, por lo que las dos disoluciones se encuentran a la misma temperatura, evitándose la aparición de gradientes térmicos. Los electrodos de medida son de Ag/AgCl, fabricados utilizando el método de Brown [5].

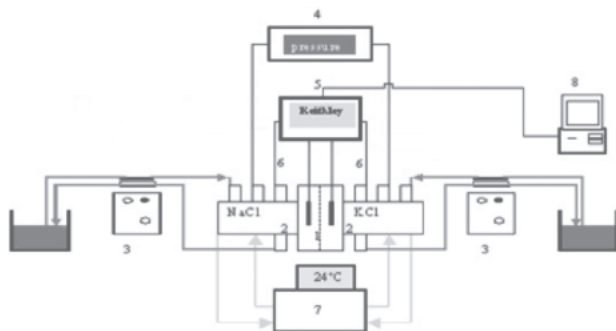


Figura2. Dispositivo experimental: 1. Contenedor de membrana y electrodos. 2. Contenedores de las disoluciones. 3. Bombas peristálticas. 4. Medidor de presión. 5. Multímetro. 6. Sonda de temperatura. 7. Termostato. 8. PC

4. Resultados

Las disoluciones empleadas se han preparado a la misma concentración, para cada experimento. En la Tabla 1 se recogen los resultados obtenidos para todas las temperaturas estudiadas y concentraciones de $5 \times 10^{-3} \text{M}$ para K^+ y Na^+ .

q ($^{\circ}\text{C}$) ($\pm 0,1$)	D_{Na^+} ($\cdot 10^{-5} \text{cm}^2/\text{s}$)	D_{K^+} ($\cdot 10^{-5} \text{cm}^2/\text{s}$)
20	1.4 ± 0.2	1.5 ± 0.1
30	1.6 ± 0.1	1.7 ± 0.1
40	1.9 ± 0.2	2.1 ± 0.1
50	2.2 ± 0.2	2.5 ± 0.1

Tabla 1. Coeficientes de difusión de K^+ en disolución acuosa de $\text{KCl } 5 \times 10^{-3} \text{M}$, obtenidos a partir de las medidas de potencial bi-iónico para el sistema $\text{NaCl}(\text{ac}) \mid \text{membrana} \mid \text{KCl}(\text{ac})$ para las diferentes temperaturas de trabajo, en función de los valores correspondientes para el Na^+ que se obtienen mediante la célula de difusión rotatoria (RDC) a una frecuencia de 2,5 Hz

5. Conclusiones

Se ha abordado el estudio experimental de la respuesta bi-iónica del sistema, con relación a los cambios de temperatura (rango: 20°C - 50°C) y de concentración (rango $0,001 \text{ M}$ - $0,1 \text{ M}$), observándose, en todos los casos estudiados, que el potencial tiene un comportamiento variable con la concentración impuesta, aunque el comportamiento cualitativo es similar en todos los casos considerados, mostrándose un valor máximo, cuya cuantía varía con la temperatura y la concentración, tendiendo después a una respuesta cuasi-estabilizada y concretamente para disoluciones mayores de $0,025 \text{ M}$, se observa que el máximo de potencial disminuye cuando la temperatura aumenta.

Por último, en los modelos teóricos existentes, el potencial bi-iónico es función de los coeficientes de difusión de los iones utilizados. En nuestro caso, se ha establecido un modelo sencillo para la obtención de coeficientes de difusión catiónicos (K^+) a diferentes temperaturas y concentraciones, a partir de las medidas de los mismos para otro catión (Na^+), tomado como patrón, cuyos valores se obtienen mediante una RDC, empleándose la misma membrana de intercambio catiónico en ambos casos [6], con el objetivo de comparar los resultados experimentales y lo previsto teóricamente.

REFERENCIAS

1. Tasaka, M., Kimono, R., Yoo D., "Membrane potential across a high water content anion-exchange membrane separating two solutions with a common counterion but two different co-ions", J. Phys. Chem. B, **103**, 173-177 (1999).
2. Guirao, A., *Tesis de Licenciatura*, Univ. Murcia, Murcia (1994).
3. Guirao A., Mafé S., Manzanares, J.A. Ibañez J.A., "Bi-ionic potential of charged membranes: effects of the diffusion boundary layers", J. Phys. Chem., **99**, 3387-3393 (1995).
4. Nouri, S., Lammak, L., Bulvestre, G., Auclair, B., "Studies of the crossed ionic fluxes through a cation-exchange membrane in the case of Donnan dialysis", Desalination **148**, 383-388 (2002).
5. Forte, J., "Tesis de licenciatura", Universidad de Murcia, Murcia, 1986.
6. García-Gamuz, J.A., *Tesis doctoral*; Univer. Murcia, Murcia, 2009.

Propiedades térmicas de sistemas iónicos en el punto crítico líquido-líquido

Pablo Méndez-Castro¹, Jacobo Troncoso², José Peleteiro³, Luis Romani⁴

¹Departamento de Física Aplicada, Universidad de Vigo; pablomen @uvigo.es.

²Departamento de Física Aplicada, Universidad de Vigo; jacobote@uvigo.es.

³Departamento de Física Aplicada, Universidad de Vigo; salgado@uvigo.es.

⁴Departamento de Física Aplicada, Universidad de Vigo; romani@uvigo.es.

La criticalidad de los fluidos iónicos ha sido objeto de un intenso análisis en los últimos veinte años, principalmente motivado por la cuestión sobre si los fluidos iónicos presentan un comportamiento crítico tipo Ising o presentan otro tipo de clase de universalidad. En la actualidad está claro que muestran una criticalidad tipo Ising, sin embargo, presentan varias características especiales: una extremada asimetría y muy pequeñas amplitudes en las curvas de coexistencia^{1,2,3,4}.

En este trabajo se ha determinado la capacidad calorífica isobárica molar, C_p , y la entalpía molar de exceso, h^E , para un conjunto de sistemas binarios formados por un líquido iónico y un disolvente molecular. Además se han determinado las curvas de equilibrio líquido-líquido usando un método calorimétrico⁵. Los sistemas se han seleccionado de forma que representan una gama de comportamientos desde el claramente solvofóbico al coulombico, lo que, en primera aproximación, está determinado por la permitividad dieléctrica del disolvente^{6,7,8}. Los resultados muestran que el carácter crítico solvofóbico, característico de disolventes moleculares con una alta permitividad dieléctrica es similar al encontrado para los sistemas moleculares binarios, pero los sistemas coulombicos, con una baja permitividad para el disolvente molecular, presentan un comportamiento bastante alejado para los resultados obtenidos habitualmente para estas magnitudes cerca de la transición de fase líquido-líquido. Estos sistemas muestran una anomalía crítica en C_p extremadamente pequeña (varios órdenes de magnitud menor de lo habitual) y valores extremadamente pequeños para h^E (para el sistema [EMIM][NTf₂]+Diethylcarbonate es negativa, hecho nunca observado para ninguna transición líquido-líquido de tipo UCST).

REFERENCIAS

1. M. E. Fisher, J. Phys.: Cond. Matter 8, 9103 (1996).
2. G. Stell, J. Stat. Phys. 78, 197 (1995).
3. K. S. Pitzer, Acc. Chem. Res. 23, 333 (1990).
4. S. Wiegand, J. M. H. L. Sengers, M. Kleemeier, and W. Schöer, J. Chem. Phys. 109, 9038 (1998).
5. C. A. Cerdeiriña, J. A. Míguez, E. Carballo, C. A. Tovar, and L. Romani, Thermochim. Acta 347, 37 (2000).
6. H. Wiegärtner and W. Schröer, Adv. Chem. Phys. 116, 1 (2001).
7. M. Wagner, O. Stanga, and W. Schröer, Phys. Chem. Chem. Phys. 5, 3943 (2003).
8. W. Schröer and V. R. Vale, J. Phys.: Cond. Matter 21, 424119 (2009).

Sincronización en cadenas estocásticas no-lineales

M. Morillo¹, J. Gómez Ordoñez¹, J. M. Casado¹, A. Córdoba², M. C. Lemos²

¹ Física Atómica, Molecular y Nuclear (Física Teórica), Universidad de Sevilla; morillo@us.es.

² Física de la Materia Condensada, Universidad de Sevilla.

Uno de los aspectos interesantes de la dinámica de los sistemas complejos no-lineales es la posibilidad de que existan fenómenos de sincronización. Además de la no-linealidad de la dinámica, otros factores como la existencia de fuerzas externas deterministas o estocásticas dependientes del tiempo pueden tener una influencia decisiva en los fenómenos de sincronización. En particular, tiene interés analizar la posible influencia del ruido en el proceso de sincronización entre una fuerza externa aplicada, dependiente del tiempo y la respuesta que ésta provoca en el sistema.

El fenómeno de sincronización controlada por ruido ha sido objeto de amplios estudios en sistemas simples caracterizados por una sola variable que satisface una ecuación de tipo Langevin, que incorpora el término de ruido, así como la fuerza externa dependiente del tiempo. Definiendo adecuadamente la fase asociada a la respuesta temporal del sistema como un proceso aleatorio, se pueden bajo ciertas circunstancias, obtener expresiones analíticas para el valor medio de la frecuencia de la fase, así como del coeficiente de difusión de la misma. Ambas cantidades dan una idea bastante adecuada del grado de sincronía entre la fuerza externa periódica y la respuesta aleatoria del sistema. Estos estudios en sistemas simples se han extendido a regímenes cuánticos disipativos caracterizados por un efecto túnel incoherente entre estados localizados.

En sistemas complejos formados por un gran número de unidades excitables o resonadores estocásticos desacoplados también se han estudiado efectos de sincronización en la respuesta a fuerzas externas muy débiles de modo que una descripción dentro de los límites de la teoría de la respuesta lineal debería ser, al menos en principio, viable.

En nuestro trabajo, hemos considerado sistemas complejos formados por muchas unidades con dinámicas no-lineales y acopladas entre sí. La variable de interés en la que analizamos la posible sincronización es una variable colectiva definida como una combinación lineal de las variables que caracterizan cada elemento. Así pues, aunque el sistema tenga una descripción digamos microscópica, en la que sabemos las ecuaciones estocásticas que rigen el comportamiento de cada una de las individualidades, desde un punto de vista práctico lo que interesa es el comportamiento global de una sola macrovariable que caracterice al sistema como un todo. Desde un punto de vista teórico-analítico esto presenta problemas difíciles pues ni siquiera se conoce en general la ecuación estocástica de partida de la variable colectiva. Así pues, si queremos avanzar en el conocimiento de las propiedades de dicha variable tendremos que acudir a esquemas de simulación numérica de las ecuaciones estocásticas para cada individuo.

Si llamamos x_i ($i=1, \dots, N$) a la variable característica de cada unidad y suponemos que $\mathbf{x}(t)$ viene descrito por N ecuaciones de Langevin acopladas con términos de ruido blanco, gaussiano, delta-correlacionados e independientes entre sí, definimos una variable colectiva

$$S(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i(t)$$

Para bajas intensidades del ruido y fuerzas deterministas externas con periodos suficientemente largos, la solución numérica de las ecuaciones de Langevin indica que cada trayectoria de $S(t)$ consta básicamente de pequeñas fluctuaciones alrededor de unos atractores y saltos entre estos que ocurren en instantes aleatorios. Introducimos pues una fase aleatoria $\phi(t)$ asociada a $S(t)$ de modo que

$$\phi^{(\alpha)}(t) = \pi N^{(\alpha)}(t)$$

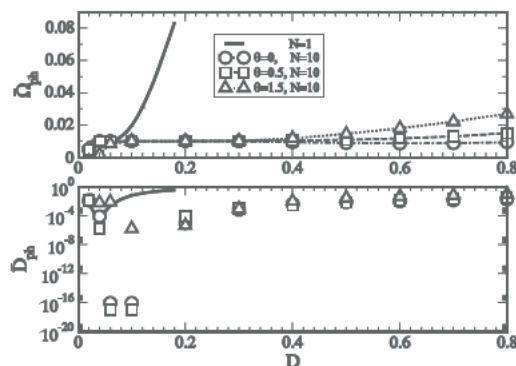
donde $N^{(\alpha)}(t)$ es el número de saltos entre atractores a lo largo de la trayectoria α durante un intervalo de tiempo $(0, t]$. A partir de los dos primeros cumulantes del proceso $\phi(t)$ definimos una frecuencia media de fase

$$\overline{\Omega}_{ph} = \frac{1}{T} \int_{nT}^{(n+1)T} dt \frac{d\langle \phi(t) \rangle}{dt}$$

y un coeficiente de difusión

$$\overline{D}_{ph} = \frac{1}{T} \int_{nT}^{(n+1)T} dt \frac{d\langle\langle \phi(t) \rangle\rangle}{dt}$$

Nuestros resultados muestran que existen intervalos de valores de la intensidad del ruido para los que la frecuencia media de fase coincide con la frecuencia de la fuerza externa. La extensión de este rango depende del número de elementos de la cadena, de modo que el rango de valores para los que la variable colectiva se sincroniza con la fuerza externa es mucho mayor que la sincronía de un elemento aislado. Asimismo, la pequeñez del coeficiente de difusión indica que el ajuste entre frecuencias es casi perfecto en el rango de valores de ruido indicado. Un ejemplo de este comportamiento puede observarse en la figura adjunta correspondiente a una fuerza externa periódica de amplitud 0.2 y frecuencia fundamental de 0.01 (unidades arbitrarias).



Sistema calorimétrico en el rango de temperaturas 0.05K a 30K

Tomás P. Castañeda¹ y Miguel A. Ramos²

Laboratorio de Bajas Temperaturas, Departamento de Física de la Materia Condensada
Universidad Autónoma de Madrid, Cantoblanco, 28049 Madrid

¹tomas.perez@uam.es; ²miguel.ramos@uam.es

Hemos desarrollado un sistema versátil para medidas del calor específico a bajas temperaturas (2K – 30K) y muy bajas temperaturas (50mK – 2K), en muestras sólidas de masa típicamente decenas de miligramo. Utilizamos un calorímetro isoperibólico [1-3] y el método de relajación, con lo que somos capaces de determinar el valor absoluto del calor específico de las muestras con una precisión $< 3\%$, que se puede emplear tanto para medir en un entorno de ^4He como en refrigerador de dilución. Presentamos medidas preliminares del calor específico de muestras de ámbar, así como la calibración de la celda vacía.

El estudio de las propiedades térmicas de materiales a muy bajas temperaturas requiere con frecuencia utilizar muestras con una masa de pocos miligramos. Esto es así debido a la necesidad de ser capaces de enfriar hasta la temperatura mínima y en un tiempo razonable el material de estudio. En nuestro caso, utilizamos un calorímetro basado en un sustrato de zafiro de 25mm de diámetro y 0.5mm de espesor, sobre el que colocamos un termómetro tipo Cernox y una resistencia superficial con valor a ambiente de 100 Ω . La celda tiene un contacto térmico débil con el foco, que se ajusta para que los tiempos de relajación de la celda con la muestra varíen entre 10s y unos pocos minutos.

En la Figura 1 se observa la celda con sustrato de zafiro suspendida mediante hilos de nylon del anillo que sirve como foco térmico controlado. Los elementos están pegados al zafiro utilizando epoxi de plata, para conseguir un buen contacto térmico.

Para la medida del calor específico empleamos el método de relajación estándar, en el cual partimos de una temperatura base T_0 , aplicamos un pulso de calor hasta alcanzar una nueva temperatura de equilibrio T_1 , dejando relajar la celda a T_0 con un tiempo característico τ . Contamos con un método de relajación alternativo [4], en el que no alcanzamos el estado de equilibrio a T_1 , sino que cortamos antes el pulso de calor, analizándose tanto la curva de carga como de descarga térmica. Esto nos permite hacer medidas rápidas para valores de capacidad calorífica mayores.

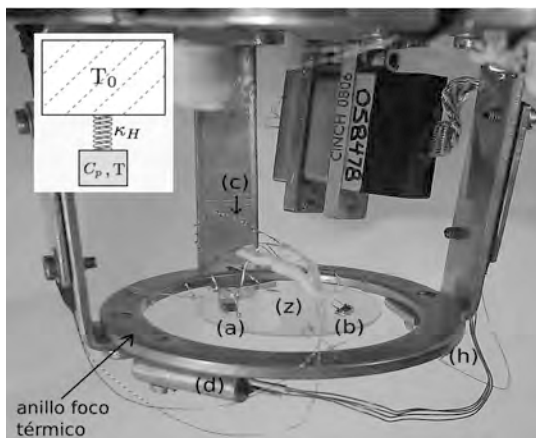


Figura 1. Celda calorimétrica para muestras sólidas. Sobre el sustrato de zafiro (z) se colocan el termómetro (a) y calentador (b) opuestos diametralmente. El contacto con el foco (anillo) se realiza mediante un hilo de cobre o plata (c). El control en el anillo se hace utilizando un sensor de Germanio (d) y un calentador (h). Inserto: Esquema térmico simplificado de la celda con contacto débil al baño.

Utilizando los dos métodos de relajación térmica [4] anteriormente descritos, hemos realizado la calibración de la celda vacía en el rango 2K–30K, con la que hemos medido el calor específico de muestras de vidrio de ámbar de unos 30 mg de masa.

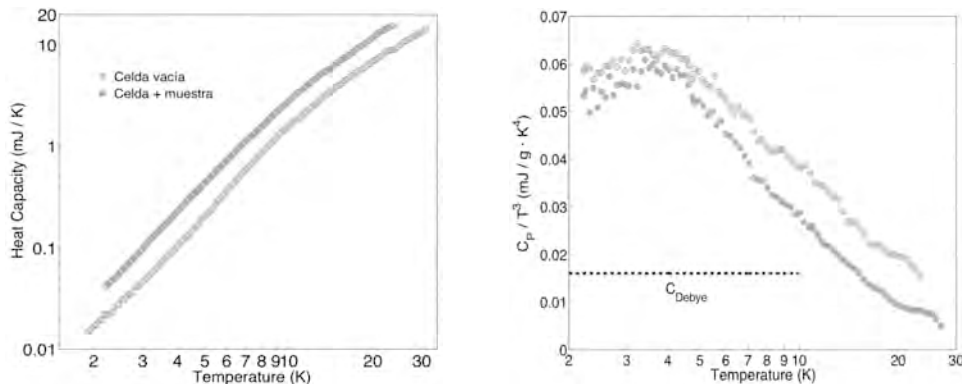


Figura 2. (a) Capacidad calorífica de la celda vacía del montaje en ^4He y con una muestra de ámbar de 30mg. (b) Calor específico de dos muestras de ámbar en la representación C_p/T^3 , donde se aprecia el pico bosónico con máximo en $T = 3.7\text{K}$, así como el nivel de Debye para este vidrio.

La celda para calor específico se puede modificar para aumentar o disminuir su capacidad calorífica, en función del tipo de muestras que se vayan a medir. En la Figura 2a mostramos la curva de capacidad calorífica de la celda vacía para el sistema de ^4He , y la celda con una muestra de 30mg de ámbar. En la Figura 2b, el calor específico de dos muestras de ámbar en la representación C_p/T^3 frente a T , una vez restada la contribución de la celda vacía. Se aprecia el pico bosónico característico de los vidrios, con $T_{\text{máx}} = 3.7\text{K}$.

La electrónica empleada para las medidas de calor específico es sencilla. Para las medidas de 2K – 30K se emplean un controlador Lakeshore 336 para la medida de la temperatura de la muestra y control del foco, junto con una fuente de corriente 1nA – 1mA y un multímetro Keithley para aplicar los pulsos de calor y la medida de la potencia. En el caso de las medidas de muy baja temperatura a 50mK – 2K, se emplea un puente AC Lakeshore 370 para la lectura del termómetro de la muestra, que permite reducir drásticamente la disipación de calor al medir la resistencia.

La dependencia de los componentes de nuestra celda con el campo magnético es débil, lo que nos ha permitido el desarrollo y próxima utilización de este sistema calorimétrico con campos magnéticos de hasta 9T y muestras de masa típicamente 1mg.

Este trabajo ha sido financiado por el Ministerio de Ciencia e Innovación a través del proyecto CONSOLIDER Nanociencia Molecular CSD2007-00010, el Ministerio de Educación a través la beca FPU2008-00030 y por la Comunidad de Madrid a través del proyecto NANOBIOIMAGNET S2009/MAT-1726. Agradecemos al Dr. R.J Jiménez-Rioboó las medidas de la velocidad del sonido en el ámbar.

REFERENCIAS

1. Bachmann R, DiSalvo Fj *et al.*, *Rev. Sci. Instrum.*, **43**, 205-213 (1972)
2. Stewart G R, *Rev. Sci. Instrum.*, **54**, 1-11 (1983)
3. Brando M, *Rev. Sci. Instrum.*, **80**, 095112 (2009)
4. Pérez-Enciso E & Ramos MA, *Thermochimica Acta*, **461**, 50-56 (2007)

Teoría y simulación de Histéresis Angular en gotas sésiles

M.J. Santos¹, J.A. White²

¹Departamento de Física Aplicada, Universidad de Salamanca; smjesus@usal.es

²Departamento de Física Aplicada, Universidad de Salamanca; white@usal.es

La ecuación de Young [1] describe el ángulo de contacto de equilibrio θ_{Young} para una gota sobre un sustrato. De acuerdo con esta ecuación, θ_{Young} tiene un valor único que sólo depende de las energías libres interfaciales entre las fases sólida, líquida y vapor. En la práctica, sin embargo, debido a la naturaleza heterogénea del sustrato sólido se observan una serie de ángulos de contacto estables, este fenómeno es conocido como *histéresis del ángulo de contacto*, o *histéresis angular*.

Experimentalmente es posible obtener un ciclo de histéresis aumentando (con una jeringuilla o una pipeta) el volumen de una gota de líquido depositada sobre un sustrato y posteriormente retirando el líquido, disminuyendo así su volumen. Se observa que el ángulo de contacto no es el mismo durante estos dos procesos. Denominando θ_a al *ángulo de contacto de avance* (primera fase) y θ_r al *ángulo de contacto de retroceso* (segunda fase), se verifica: $\theta_r \leq \theta_{\text{Young}} \leq \theta_a$.

En este trabajo se trata de reproducir los resultados experimentales obtenidos por C.N.N. Lam *et al.*[2] en un ciclo de histéresis de una gota de agua depositada en una superficie sólida consistente en una oblea de silicio recubierta de ácido poliláctico. Para ello se siguen dos métodos, por un lado la resolución de la ecuación de *Young-Laplace* y por otro una simulación con el programa *Surface Evolver* [3]. En ambos casos, se introduce un término de fricción que permite describir adecuadamente la histéresis angular.

- a) Se resuelve la *ecuación de Young-Laplace en coordenadas cilíndricas*. Se evoluciona la gota variando el volumen en pequeños incrementos, aumentándolo desde V_i a V_f y luego disminuyéndolo, a velocidad constante en ambos casos.

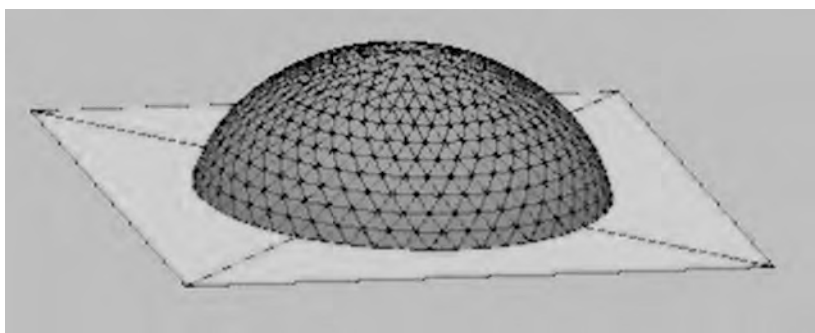


Figura 1. Forma de la gota durante el proceso de variación de volumen con el programa *Surface Evolver*[3].

- b) *Surface Evolver* [3] es un programa informático destinado al modelado de la forma de superficies sometidas a diferentes fuerzas o ligaduras. Dadas sus características *Surface Evolver* [3] es una herramienta ideal para el análisis de gotas sésiles a partir de sus interfaces. Éstas son descritas por medio de una

triangulación (Fig. 1) que puede modificarse (refinándose) y reajustarse durante el proceso de minimización de la energía del sistema.

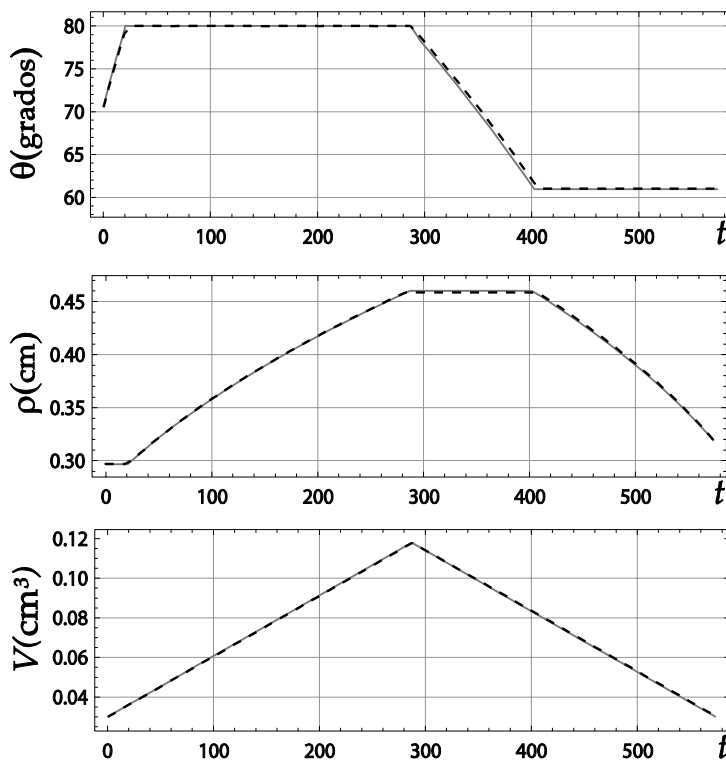


Figura 2. Ciclo de histéresis de una gota de agua. Comparación de los resultados experimentales de Lam et al. [2] (puntos azules) con los obtenidos a partir de la ecuación de Young-Laplace (línea continua roja) y de simulación con Surface Evolver [3] (línea discontinua negra).

Posteriormente se comparan los resultados con los obtenidos experimentalmente por Lam et al.[2] y resolviendo la ecuación de Young-Laplace. En la Fig. 2 se representan los resultados obtenidos para el radio de contacto, ρ , y el ángulo de contacto, θ , en función del tiempo. También se representa la variación del volumen V frente al tiempo.

REFERENCIAS

1. C.N.C. Lam et al. *Advances in Colloid and Interference Science* **96** 169-191 (2002)
2. T. Young, *Philos. Trans. R. Soc. London*, **95**, 65-87 (1805).
3. K.A. Brakke, *Exp. Math.* **1**(2), 141 (1992)

Teorías de perturbaciones para mezclas binarias de esferas duras no aditivas

J. R. Solana¹

¹Departamento de Física Aplicada, Universidad de Cantabria; e-mail: ramon.ssolana@unican.es

Introducción

Las mezclas de esferas duras no aditivas (NAHS) resultan de interés como sistemas de referencia en el estudio de mezclas reales mediante teoría de perturbaciones. En las mezclas NAHS, la distancia entre los centros de dos esferas de la misma especie en contacto es igual al diámetro de las mismas, mientras que en el caso de esferas de distintas especies i y j , con diámetros σ_{ii} y σ_{jj} , es $\sigma_{ij} = (1/2)(\sigma_{ii} + \sigma_{jj})(1 + \Delta)$, donde Δ es el parámetro de no aditividad, que puede ser positivo o negativo. Valores $\Delta > 0$ producen tendencia del sistema a la separación de los componentes de la mezcla, mientras que valores $\Delta < 0$ tienden a favorecer la heterocoordinación. En el caso de mezclas simétricas, que es el que consideraremos aquí, todas las esferas tienen el mismo diámetro σ . Para el estudio teórico de este tipo de mezclas se han utilizado frecuentemente diversos tipos de teorías de perturbaciones. Recientemente se ha propuesto [1] un nuevo tipo de teoría de perturbaciones cuya fiabilidad para mezclas NAHS analizaremos aquí en comparación con otras teorías de perturbaciones usadas para el mismo tipo de mezclas.

Teoría de perturbaciones basada en la función de Mayer

En la teoría de perturbaciones de segundo orden basada en la función de Mayer (MFPT), la energía libre de una mezcla binaria de esferas duras no aditivas constituido por N_A esferas de la especie A y N_B esferas de la especie B , todas ellas con el mismo diámetro σ , considerando como perturbación la desviación con respecto a la aditividad, correspondiente a $\Delta = 0$, se expresa:

$$\beta F = \beta F_0 + \beta F_1 + \beta F_2 \quad (1)$$

donde $\beta = 1/kT$, F_0 es la energía libre de una mezcla de esferas duras aditivas con el mismo diámetro σ y densidad numérica ρ y

$$\beta F_1 = -4\pi N_A N_B \rho \int_0^\infty g_{AB}^{(0)}(r) f_{AB}(r) r^2 dr \quad (2)$$

$$\beta F_2 = 2\pi N \rho \int_0^\infty g_{AB}^{(0)}(r) f_{AB}^2(r) r^2 dr - \frac{1}{2} \beta^2 \left[\left\langle \left(U_1|_0 \right)^2 \right\rangle_0 - \left\langle U_1|_0 \right\rangle_0^2 \right] \quad (3)$$

donde $f_{AB}(\eta_{ij}) = e^{-\beta u_1(\eta_{ij})} - 1$ es la función de Mayer para el potencial perturbativo entre pares $u_1(\eta_{ij})$, U_1 es la contribución perturbativa a la energía potencial total del

sistema, $g_{AB}^{(0)}(r)$ es la función de distribución radial para los pares de tipo AB del sistema de referencia de esferas duras aditivas, los corchetes angulares indican promedios, el subíndice 0 indica que los promedios se realizan en el sistema de referencia y las cantidades con prima indican derivadas con respecto al parámetro de acoplamiento del potencial perturbativo al de referencia. El último término de la expresión (3) resulta muy difícil de calcular analíticamente, por lo que se desprecia y la expresión de βF_2 se reduce al primer término del segundo miembro de la (3).

Resultados

La teoría de perturbaciones que acabamos de esbozar proporciona muy buena concordancia con los datos de simulación para la densidad crítica ρ_c de la separación de los componentes de la mezcla en mezclas simétricas binarias de esferas duras no aditivas con parámetro de no aditividad en el rango $0 \leq \Delta \leq 1$. Predice también con bastante precisión la curva de equilibrio de fases cerca del punto crítico, pero fuera de dicha región aparecen diferencias con respecto a los datos de simulación que aumentan a medida que nos alejamos del punto crítico y tanto más cuanto mayor es Δ .

Por lo que se refiere a la ecuación de estado, los resultados que proporciona la teoría MFPT son muy satisfactorios para $0 \leq \Delta \leq 0.2$, pero empeoran progresivamente a altas densidades para valores mayores de Δ . Para valores negativos del parámetro de no aditividad la teoría no proporciona buenos resultados, aunque la situación podría cambiar si el último término de la expresión (3) pudiera calcularse con precisión. Otras teorías de perturbaciones analizadas para este tipo de mezclas tampoco proporcionan resultados satisfactorios para amplios rangos de valores positivos y negativos de Δ .

Agradecimientos. Este trabajo ha sido financiado por el Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN) Proyecto No. FIS2009-09616.

REFERENCIAS

1. Sillrén, P., Hansen, J.-P. *Mol. Phys.* **105**, 1803-1811 (2007)

UNIFAC y UNIFAC-FV en el Tratamiento de la Solubilidad de Gases no Polares en Éteres Cíclicos a 101.33 kPa

F. Gibanel¹, J. Barrero¹, A.M.F. Palavra³, J.S. Urieta^{1,2}, J.I. Pardo^{1,2}, A.M. Mainar^{1,2}

¹Departamento de Química Física, Universidad de Zaragoza; ammmainar@unizar.es.

²División de Procesos y Reciclados, Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A), Universidad de Zaragoza; gathers@unizar.es.

³Centro de Química Estrutural (CQE), Instituto Superior Técnico, Lisboa; antonio.palavra@ist.utl.pt.

Introducción

El interés creciente que los modelos de contribución de grupos han despertado a lo largo de estas cinco décadas radica, más que en un conocimiento sobre las causas mismas del comportamiento de la materia, en su aplicación a problemas de índole eminentemente práctico, especialmente a los que con más asiduidad demanda la industria (procesos de separación, destilación, refrigeración, etc.). Pese al gran avance que han experimentado los sistemas de computación en los últimos años, todavía la simulación molecular se encuentra lejos de resolver de forma rápida y precisa la problemática que afecta a dichas operaciones industriales, sobre todo cuando la complejidad de los compuestos implicados es considerable. Por este motivo, modelos como UNIFAC siguen estando muy presentes en las labores diarias del cálculo de propiedades termofísicas y del equilibrio de fases [1].

Dada la importancia que tiene el estudio teórico y experimental del equilibrio gas-líquido en múltiples procesos químicos y la cuasi inexistencia en la literatura de libre acceso de parámetros de interacción que incluyan gases, presentamos aquí 18 nuevos pares de parámetros de interacción éter-gas para los modelos UNIFAC [2] y UNIFAC-FV [3]. Estos parámetros fueron calculados a partir de una base de datos propia de medidas de solubilidad de nueve gases –Ne, Ar, Kr, Xe, N₂, CH₄, C₂H₆, CF₄ y SF₆– en cinco éteres cíclicos: tetrahidrofurano, tetrahidropirano, óxido de hexametileno, 2-metiltetrahidrofurano y 2,5-dimetiltetrahidrofurano a presión atmosférica y temperaturas entre 273.15 K y 303.15 K.

Bases de Datos

Para la obtención de los parámetros de interacción éter-gas se recalcularon [] los parámetros “alcano-éter” y “alcano-gas” haciendo uso de un total de 150 sistemas y 619 puntos experimentales distribuidos de la siguiente forma:

- Parámetros “alcano-éter”: 12 sistemas y 202 puntos experimentales. $\Delta\gamma_i = 6.2\%$
- Parámetros “alcano-gas”: 138 sistemas y 417 puntos experimentales. $\Delta x_{\text{gas UNIFAC}} = 17.4\%$; $\Delta x_{\text{gas UNIFAC-FV}} = 8.1\%$.

Esta labor [4, 5] fue el resultado de una importante revisión bibliográfica de monografías especializadas, libros y artículos que en ocasiones precisaron de una transformación para unificar las distintas unidades empleadas en la expresión de la medida de la solubilidad de un gas en un líquido.

Cálculos y Resultados

En los cálculos de los parámetros “éter-gas” se utilizaron las solubilidades experimentales gas-éter cíclico determinadas por F. Gibanel [5] en nuestro laboratorio y que constituyen un total de 180 puntos.

La evaluación de los parámetros de interacción se efectuó mediante la optimización de la siguiente función objetivo

$$F = \sum_j \frac{1}{2N_w} \left[\sum_k \sum_i^n \left(\frac{\gamma_{jki}^{\text{exp}} - \gamma_{jki}^{\text{cal}}}{\gamma_{jki}^{\text{exp}}} \right)^2 \right]$$

donde N_s es el número de sistemas, N_w el número de puntos para un sistema dado, n el número de componentes y γ se refiere a los coeficientes de actividad experimentales o calculados. La tabla 1 muestra los parámetros de interacción “éter-gas”, “gas-éter” calculados junto con los correspondientes “alcano-éter” y “alcano-gas”. Los mejores resultados en la correlación de las solubilidades de los gases no polares en los éteres cíclicos considerados se obtuvieron para el modelo UNIFAC-FV siendo la desviación porcentual promedio del 6.9% frente al 16.5% correspondiente al modelo UNIFAC original. Estos valores constatan la idoneidad de la variante de volumen libre en su aplicación al tratamiento de las solubilidades de gases en líquidos a baja presión como consecuencia de la diferencia de volumen molar de los componentes de la disolución y de la expansión del volumen que se produce en la mezcla.

n (no)	1	13	57	59	68	68	78	71	72	78
	¹³ CH ₄	¹³ CH ₂ O	CH ₄	Ar	N ₂	SE ₂	Ne	Et	Xe	CH ₄
1 ¹³ CH ₄	0	-211.8	1309	416.9	2154	859.7	2944	817.5	165.9	214.6
			84.1	719.6	1952	702.9	2486	525.3	-58.97	203.8
13 ¹³ CH ₂ O	-6.700	0	1019	610.0	1435	582.3	2443	638.7	166.9	742.6
			479.2	565.5	1377	679.2	2382	551.4	54.5	1002
57 CH ₄	-412.4	-78.00	0							
	-324.2	4305								
59 Ar	-105.5	143.8		0						
	-327.6	9102								
68 N ₂	-525.6	2.700			0					
	-489.9	-62.78								
68 SE ₂	-325.4	-26.12				0				
	-283.9	-9.863								
78 Ne	-445.7	-38.60					0			
	-405.8	10.91								
71 Et	-329.2	7.280						0		
	-265.1	-84.24								
72 Xe	-85.24	194.3							0	
	10.38	35.25								
78 CH ₄	-94.85	-40.78								0
	-169.0	-75.90								
88 CF ₄	-403.2	30.26								
	-241.7	8.73								

Grupo	Subgrupo	n°	R _k	Q _k
1	CH ₃	1	0.9011	0.8480
	CH ₂	2	0.6744	0.5400
	CH	3	0.4469	0.2280
	C	4	0.2193	0.0000
13	CH ₂ O	25	1.1450	1.088
	CH ₂ O	26	0.9183	0.780
	CHO	27	0.6905	0.468
	CH ₂ O	28	0.9183	1.1
57	CH ₄	111	1.1290	1.124
59	Ar	112	1.1850	1.070
68	N ₂	114	0.9340	0.985
68	SE ₂	121	2.9743	2.680
70	He	123	0.6074	0.718
71	Kr	124	1.3708	1.3353
72	Xe	125	1.6770	1.4151
78	C ₂ H ₆	131	1.3022	1.696
88	CF ₄	133	1.7277	1.760

Tabla 1. Parámetros de interacción a_{nm} , a_{nn} . Línea superior UNIFAC, línea inferior UNIFAC-FV. Se incluyen también los valores de las constantes R_k y Q_k utilizadas para los distintos grupos.

Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo económico del MICINN-FEDER (CTQ2009-14629-C02-02) y del Departamento de Ciencia, Tecnología y Universidad del Gobierno de Aragón-Fondo Social Europeo (Grupo E52).

REFERENCIAS

1. Constantinescu, D., Rarey, J., Gmehling, J., *Ind. Eng. Chem. Res.*, **48**, 8710-8725 (2009)
2. Fredenslund, A., Jones, R.L., Prausnitz, J.M., *AIChE J.*, **21**, 1086-1099 (1975)
3. Nocon, G., Weidlich, U., Gmehling, J., Onken, U., *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*, **87**, 17-23 (1983)
4. Barrero, J. (1995). Correlación y Cálculo de Solubilidades de Gases en Líquidos según el Método de Contribución de Grupos UNIFAC. Tesis de Licenciatura, Universidad de Zaragoza.
5. Gibanel, F. (1991). Estudio Químico-Físico de Solubilidades de Gases No Polares en Éteres Cíclicos. Tesis Doctoral. Universidad de Zaragoza.

Viscosidades de los Sistemas N-Metilformamida + 1,2-Alcanodiolos a Diferentes Temperaturas

E.C. Bentancor¹, E. Romano², J.L. Trenzado³, A. El-Asmar⁴, S. Galván⁵, M.N. Caro⁶

¹Departamentode Física, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria; estefania.betancor101@alu.ulpgc.es

²Departamento de Química, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria; eromano@dqui.ulpgc.es

³Departamentode Física, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria; jltrenzado@dfis.ulpgc.es

⁴Departamentode Física, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria; alia.el101@alu.ulpgc.es

⁵Departamentode Física, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria; sgalvan@dfis.ulpgc.es

⁶Departamentode Química, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria, mcaro@dqui.ulpgc.es

Las amidas son objeto de estudio debido, entre otros motivos, a que son buenos disolventes de muchos compuestos orgánicos e inorgánicos. Con objeto de abundar en el estudio de las propiedades termodinámicas y de transporte de las amidas y sus mezclas, se está llevando a cabo en nuestro laboratorio un estudio experimental-teórico sobre propiedades termofísicas de sistemas líquidos binarios que contengan amidas, 1,2-dioles a varias temperaturas. Los resultados presentados aquí se corresponden con algunos de los subsistemas binarios considerados en el citado proyecto. En este trabajo se reportan las propiedades viscosimétricas de los sistemas binarios N-metilformamida + (1,2-etanodiol, 1,2-propanodiol, 1,2-butanodiol). Las determinaciones experimentales para las citadas mezclas fueron llevadas a cabo a 283.15, 293.15, 303.15 y 313.15 K y a la presión atmosférica normal para todo el rango de composición. La N-metilformamida fue suministrada por Aldrich con una riqueza superior al 99%, Los dioles fueron suministrados por Fluka de riqueza para el 1,2-etanodiol y 1,2-propanodiol mayor del 99.5% y para el 1,2-butanodiol mayor 98.0 %. Todos ellos fueron desgasificados y conservados en tamiz molecular (Union Carbide tipo 0.4 nm) antes de su uso. Las viscosidades cinemáticas ν se obtuvieron a las mismas composiciones a las que fueron medidas las ρ [1], generándose ternas composición-densidad-viscosidad cinemática con las que se obtuvieron, para cada mezcla, la viscosidad dinámica η ($=\nu\rho$) y la función desviación $\Delta\eta$ ($=\eta - x_1\eta_1 - x_2\eta_2$). Los valores experimentales de ν fueron determinados con un sistema automático Schott-Geräte dotado de un dispositivo (AVS-350) capaz de medir el tiempo de flujo con una exactitud de ± 0.01 s. Las mediciones se llevaron a cabo con viscosímetros de tipo Ubbelohde, calibrados por Schott-Geräte, con una incertidumbre de ± 0.01 K en la temperatura. La incertidumbre promedio de los valores de viscosidad fue siempre menor que 0.4%. Las $\Delta\eta$ de los sistemas binarios estudiados fueron correlacionadas con la composición mediante una ecuación de tipo Redlich-Kister [2]

$$\Delta\eta = x(1-x) \sum_{k=0}^P A_k (2x-1)^k \quad (1)$$

donde los coeficientes A_k fueron calculados haciendo uso del método de mínimos cuadrados y recurriendo al test-F [3] para la selección de los parámetros ajustables. Las viscosidades experimentales (ν o η) fueron usadas para evaluar la utilidad de varias ecuaciones para describir el comportamiento viscosimétrico de las mezclas líquidas binarias aquí estudiadas. En concreto se usaron las ecuaciones de McAllister [4] (para interacciones de tres y cuatro cuerpos), Grunberg y Nissan [5], Heric [6] (con uno y dos parámetros) y Hind y col. [7].

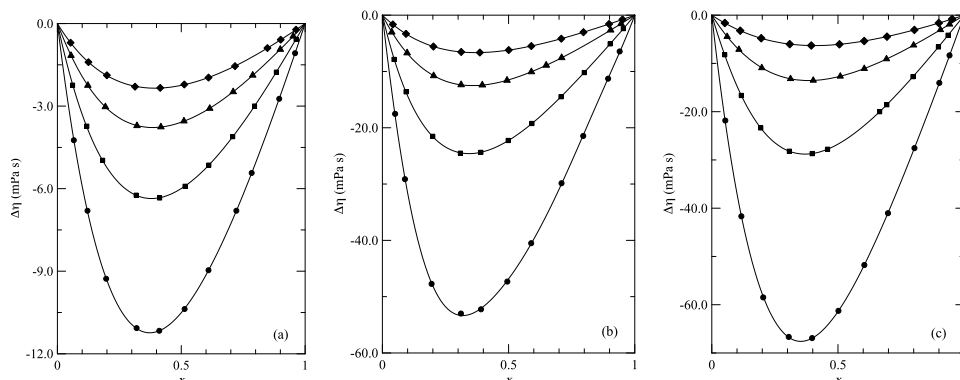


Figura 1: Desviaciones de la viscosidad de los sistemas binarios: *N*-metilformamida + (a) 1,2-etanodiol, (b) 1,2-propanodiol y (c) 1,2-butanodiol. Puntos experimentales: (●) 283.15 K; (■) 293.15 K; (▲) 303.15 K; (◆) 313.15 K. (—) curvas de ajuste obtenidas con la ecuación (2)

En la Figura 1 se puede ver que la $\Delta\eta$ en todos los sistemas estudiados son negativas en todo el rango de composición y a todas las temperaturas. Así mismo, se observa que las curvas presentan una cierta asimetría, evidenciando una acusada inclinación hacia las regiones de composición más rica en 1,2-diol. Se comprueba también que, cuando aumenta la cadena del diol, los valores de la desviación de la viscosidad se hacen cada vez más negativos, lo que sugiere que, al aumentar la cadena del alcohol, la contribución negativa a η debida a la ruptura de la estructura original de los líquidos puros se hace gradualmente mayor y que el progresivo debilitamiento de las interacciones entre moléculas distintas provoca una disminución de la viscosidad de la mezcla. En cuanto al comportamiento con respecto a la temperatura, en todos los sistemas estudiados la $\Delta\eta$ aumenta (valores menos negativos) con el aumento de esta, lo cual sugiere que el aumento de la agitación térmica provoca un refuerzo relativo de la estructura de la mezcla.

REFERENCIAS

1. Trenzado, J.L., Betancor, E.C., El-Asmar, A., Romano, E., Galván, S., González, E., Caro, M.N. Volumen Molar de Exceso de Sistemas *N*-Metilformamida + 1,2-Alcanodiolos a Diferentes Temperatura. Presentado en este Congreso
2. Redlich, O. y Kister, A.T, *Ind. Eng. Chem.*, **40**, 341-345 (1948)
3. Bevington, P., (1969). *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences*. McGraw-Hill New York
4. McAllister, R.A., *AIChE J.*, **6**, 427-431 (1960)
5. Grunberg, L. y Nissan, A.H., *Nature*, **164**, 799-800 (1949)
6. Heric, E.L., *J. Chem. Eng. Data* **11**, 66-68 (1966)
7. Hind, R.K., McLaughlin, E. y Ubbelohde, A.R., *Trans. Faraday Soc.*, **56**, 328-334 (1960)

Volumen Molar de Exceso de Sistemas N-Metilformamida + 1,2-Alcanodiolos a Diferentes Temperaturas

J.L. Trenzado¹, E.C. Bentancor², A. El-Asmar³, E. Romano⁴, S. Galván⁵, E. Gonzalez⁶, M.N. Caro⁷

¹Departamentode Física, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria; jtrenzado@dfis.ulpgc.es

²Departamentode Física, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria; estefania.betancor101@alu.ulpgc.es

³Departamentode Física, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria; alia.el101@alu.ulpgc.es

⁴Departamento de Química, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria; eromano@dqui.ulpgc.es

⁵Departamentode Física, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria; sgalvan@dfis.ulpgc.es

⁶Departamentode Química, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria; egonzalez@dqui.ulpgc.es

⁷Departamentode Química, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria; mcaro@dqui.ulpgc.es

Las amidas y sus derivados son de gran interés en bioquímica ya que son modelos simples que favorecen la comprensión de moléculas mucho más complejas. La N-metilformamida posee enlace péptido, entre los grupos: -CO el básico y -NH el ácido, una unión que es muy común en la naturaleza [1]. Como parte de una investigación más extensa, en este trabajo se han medido las densidades ρ y determinado, a partir de ellas, los volúmenes molares de exceso V^E para los sistemas N-metilformamida + (1,2-etanodiol, 1,2-propanodiol, 1,2-butanodiol) a 283.15, 293.15, 303.15 y 313.15 K. Los resultados obtenidos han sido empleados para abordar una discusión cualitativa.

El N-metilformamida (Aldrich > 99%), 1,2-etanodiol (Fluka >99.5%), 1,2-propanodiol (Fluka >99.5%) y 1,2-butanodiol (Fluka > 98.0%). no fueron sometidos a adicional purificación salvo el secado con tamiz molecular Union Carbide 0.4 nm. Los productos fueron parcialmente desgasificados con un baño ultrasónico antes de ser usados. Para medir las densidades ρ de los líquidos puros y de sus mezclas se ha utilizado un densímetro de tubo vibrante modelo Anton-Paar DMA-5000, cuya exactitud se estimó mejor que $1 \times 10^{-5} \text{ g cm}^{-3}$. Los volúmenes molares de exceso V^E fueron calculados a partir de los datos composición-densidad según la expresión:

$$V^E = \sum_{i=1}^2 \frac{x_i M_i}{\rho} - \sum_{i=1}^2 \frac{x_i M_i}{\rho_i} \quad (1)$$

donde x es la composición, M la masa molecular y el subíndice i hace referencia a los componentes puros. La temperatura del oscilador fue siempre controlada con una precisión $\pm 0.01 \text{ K}$. La incertidumbre promedio en los volúmenes molares de exceso fue siempre inferior a $2 \times 10^{-3} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$.

Los valores de V^E fueron correlacionados con la composición, a cada una de las temperaturas, usando la ecuación de Redlich y Kister [2]

$$V^E = x(1-x) \sum_{k=0}^p A_k (2x-1)^k \quad (2)$$

siendo calculados los coeficientes A_k mediante el método de mínimos cuadrados. El número óptimo de coeficientes p fue determinado usando el test-F [3], como criterio estadístico.

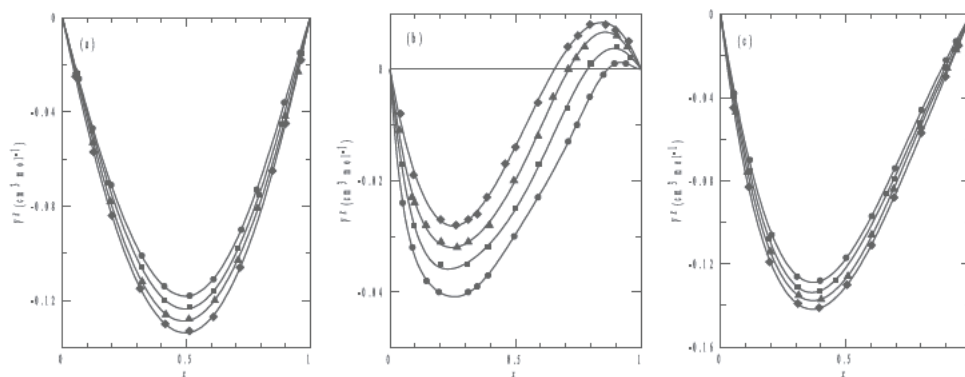


Figura 1: Volúmenes molares de exceso de los sistemas binarios *N*-metilformamida + 1,2-etanodiol (a), 1,2-propanodiol (b), 1,2-butanodiol (c). Puntos experimentales: (●) 283.15 K; (■) 293.15 K; (▲) 303.15 K; (◆) 313.15 K. (—) curvas de ajuste obtenidas con la ecuación (2)

Debido a la existencia de puentes de hidrógeno ($\text{N}=\text{O}\cdots\text{H}-\text{N}$) la *N*-metilformamida presenta una fuerte autoasociación que persiste aún en disoluciones diluidas de estos compuestos. En la figura 1 se puede observar que al ir creciendo la cadena de los dioles hay una evolución inesperada del V^E ya que tanto en el caso de combinarse con el 1,2-etanodiol o el 1,2-butanodiol, presenta valores enteramente negativos a todas las fracciones molares y temperaturas y una dependencia de esta última del tipo $(\partial V^E/\partial T) < 0$, mientras que con el 1,2-butanodiol las curvas son del tipo sigmoidal con valores positivos de V^E a altas concentraciones de la amida y con una dependencia de la temperatura del tipo $(\partial V^E/\partial T) > 0$.

Referencias

1. González, J.A., Cobos, J.C., García de la Fuente, I., *J. Mol. Liq.*, **115**, 93-103, (2004)
2. Redlich, O., Kister, A.T., *Ind. Eng. Chem.*, **40**, 341-345 (1948).
3. Bevington, P. (1969). *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences*. McGraw-Hill New York.

Índice de autores

A

Abad B., 79
 Alatorre-Meda M., 62
 Alba Venero D., 84
 Albella P., 139
 Alcaraz de la Osa R., 106
 Alonso J., 84
 Alonso J. A., 51
 Andrés J. P., 66
 Antolín A., 117
 Ares J.R., 48
 Arias I., 147
 Arribas E., 141
 Arribas P., 152
 Asenjo A., 25
 Asenjo B., 103

B

Balcells Ll., 21
 Balenzategui J. L., 103
 Barandiarán J. M., 61, 74
 Barrero J., 210
 Barriopedro D., 97
 Belandria E., 65
 Beléndez A., 110, 141
 Bentancor E.C., 188, 190, 212, 214
 Berarad M., 89
 Bernaola P., 114
 Birner T., 123
 Blanco J.A., 57, 78
 Blanco Rodríguez P., 143
 Bleda S., 110
 Briones G., 105

C

Cabanas M., 180
 Cabeza O., 180
 Cabrerizo Vílchez M., 135
 Calatayud A., 129
 Cambón A., 62
 Campo R. del, 34
 Campos J., 12
 Cardoso S., 46
 Caro M.N., 190, 212, 214
 Carpena P., 114
 Carpentier A.V., 95
 Carretero J., 114
 Casado J. M., 202
 Casanova C., 129
 Casás L.M., 147, 186
 Castañeda T. P., 204
 Castro E. V., 91
 Cativiela C., 157
 Cebriano T., 30
 Cheetham A.K., 89
 Chenlo F., 103
 Chernenko V.A., 61
 Chialvo D. R., 6
 Chicharro R., 127
 Chudnovsky E. M., 43

Clamagirand J. M., 48
 Cojocar C., 152
 Córdoba A., 202
 Córdoba R., 56
 Cremades A., 76
 Cuadros F., 159, 170
 Curry R. J., 89

D

Davis J. A., 12
 Decelle W., 17
 Díaz Angulo J.A., 149
 Díaz-Guerra C., 81
 Díaz-Guillén M. R., 66
 Domarco G., 105
 Domínguez M. C., 186
 Domínguez-Adame F., 41, 53
 Domínguez-Pérez M., 180
 Durá O. J., 66

E

Echevarría-Bonet C., 59
 El-Asmar A., 188, 190, 212, 214
 Enríquez R., 182
 Escoda Ll., 29
 Essalhi M., 152
 Estellés V., 119
 Esteve A.R., 119
 Etchart I., 89
 Ezquer R., 125

F

Farle M., 83
 Fdez-Gubieda M. L., 84
 Ferguson A.J., 85
 Fernández Barquín L., 50, 59, 84
 Fernández C., 192
 Fernández P., 32, 34
 Fernández Rodríguez M. A., 135
 Fernández-Pacheco A., 56
 Fernández-Pineda C., 197
 Ferrer I.J., 48
 Ferrer Tevar J.A., 149
 Fert A., 3
 Flahaut E., 65
 Fleitas N., 40
 Fontaña-Troitiño N., 83
 Francés J., 110
 Freitas P., 46
 Furlan W.D., 129

G

Gallego M., 161
 Gallego S., 110
 Galván S., 188, 212, 214
 Garcés-Navarro F., 172
 García J. A., 97, 123
 García de Abajo F. J., 10
 García J., 172

García J., 29, 60
 García J.A., 40
 García M.A., 121
 García-Abarrio S.M., 168, 178
 García-Cámara B., 106, 133
 García-Chamorro M., 97
 García-Fernández L., 195
 García-Gamuz J. A., 198
 García-Payo M. C., 152, 195
 García-Saiz A., 57
 Garzón L., 21
 Gibanel F., 210
 Gillin W.P., 87, 38
 Giménez F., 129
 Gimeno B., 176
 Gómez C. P., 186, 192
 Gómez Lopera J. F., 135
 Gómez Ordoñez J., 202
 Gómez-Álvarez P., 163, 194
 González A., 159, 170
 Gonzalez E., 188, 190, 214
 González F., 101, 106, 112, 133, 139
 Gonzalez J., 38, 50, 65
 González L., 29, 60
 González-Calbet J., 76
 González-Martín V., 68
 González-Salgado D., 163, 164, 194
 González-Santander C., 41
 González-Zalba M.F., 85
 Guinea F., 4
 Gutiérrez J., 61, 74

H

Haya L., 157, 168
 Heiss D., 85
 Heras M.R., 149, 155, 182
 Hernandez I., 87, 89
 Hernandez J. M., 17, 72
 Hernández-Minguez A., 17
 Hernando B., 29, 60
 Herraiz M., 125, 131
 Heuer R., 14
 Hidalgo P., 70
 Horga F. I., 51
 Hueso L.E., 23
 Huignard A., 89
 Hurtado L., 141

I

Ibáñez Mengual J. A., 198
 Ibarra M.R., 20, 56
 Iemmi C., 12

J

Jiménez A., 117
 Jiménez E., 180
 Jiménez M.J., 155, 182
 Juárez J., 62

K

Kedziorowski A., 45
 Khayet M., 152, 161, 195
 Koledov V. V., 29
 Konstantinovic Z., 21
 Kourkouvelis Ch., 5

L

Lago N., 147
 Lago-Cachón D., 40
 Largo J., 166
 Laroche M., 89
 Lasheras A., 74
 Lázpita P., 61
 Legido J. L., 147, 163, 172, 186, 192
 Lemos M. C., 202
 Lendínez S., 43
 León L., 74
 Li J., 45
 Lizana A., 12
 Llavona A., 79
 López de la Torre M. A., 66
 López E., 68
 López F., 159, 170
 López I., 70
 López M. J., 51
 López-Coronado O., 12
 López-Echarri A., 174
 López-Manchado M.A., 161
 López-Sancho M. P., 91
 Lovesey S. W., 78
 Lozano J.C., 143

M

Macià F., 17
 Macià E., 108
 Maestre D., 76
 Mainar A.M., 157, 168, 176, 178, 210
 Maldonado Pérez R., 143
 Malyshev A. V., 53
 Manteca C., 38
 Mañanes A., 51
 Marcano N., 20
 Marín M.J., 99
 Márquez A., 12, 110, 141
 Martín P., 131
 Martínez E., 18
 Martínez Aroza J., 135
 Martínez B., 21
 Martínez-García J.C., 40
 Martínez-Gutiérrez D., 63
 Martínez-Lozano J.A., 99, 119
 Mato M. M., 172
 Medina C., 186, 192
 Méndez B., 30, 70
 Méndez-Castro P., 201
 Michinel H., 95
 Míguez J. M., 163, 164, 194
 Moleón J.A., 184
 Monsoriu J.A., 129

Montes H., 79
 Montes Ruiz-Cabello J., 135
 Mora-López L., 114
 Morellón L., 20, 56
 Moreno B., 125
 Moreno F., 101, 106, 112, 133, 139
 Moreno I., 12
 Morillo M., 202
 Moshchalkov V.V., 17
 Mosquera V., 62
 Mourelle L., 186, 192
 Moya A.A., 184
 Munárriz J., 53
 Muñoz M., 18
 Muñoz M., 79
 Muñoz M.C., 45

N

Naveros I., 155
 Neipp C., 110
 Nicolás J., 12
 Nó M. L., 174
 Nogales E., 70
 Nordin M .N., 89
 Nóvoa D., 95
 Novoa J.A., 95, 105
 Novosad V., 72

O

Ocal C., 21
 Oliva J.M., 36
 Ortiz de Zárate J.M., 161

P

Pachón F. T., 117
 Palavra A.M.F., 210
 Paniagua J. M., 117
 Pardo J.L., 178, 210
 Paredes V., 121
 Pascual I., 110, 141
 Pathumakanthar N., 87
 Peche-Herrero M.A., 76
 Pedro I. de, 57
 Peleteiro J., 201
 Peña L., 21
 Pérez C., 137
 Pérez I.A., 121
 Perez L., 20, 79
 Pérez M. J., 112
 Pérez P., 168, 176
 Pérez-Sánchez G., 164
 Piliouline M., 114
 Piñeiro M. M., 163, 164
 Piqueras J., 30, 32, 34, 70, 76, 81
 Plaza M., 20
 Pomar A., 21
 Prados A., 79
 Prida V. M., 29, 60
 Prieto C., 143
 Prieto J.L., 18

Q

Quelle I., 105

R

Ramírez D., 46
 Ramírez-Castellanos J., 76
 Ramos M. A., 204
 Ranchal R., 68
 Real R. P. del, 25
 Remón L., 129
 Río S. M. del, 139
 Rivas M., 40
 Rodríguez F., 65
 Rodríguez Fernández J., 50, 57, 59
 Rodríguez Fernández L., 50, 84
 Rodríguez Valverde M. A., 135
 Rodríguez-Aseguinolaza J., 174
 Rodríguez-Bilbao I., 125
 Rodríguez-Caderot G., 125
 Rodríguez-Fernandez A., 78
 Rojas D. P., 50, 59
 Roldán M.J., 159, 170
 Romaní L., 105, 194, 201
 Romano E., 188, 190, 212, 214
 Römer R. A., 41
 Rosa W.O., 29, 60
 Rubiales F., 159, 170
 Rufo M^a M., 117
 Ruiz A., 159, 170
 Ruiz-Larrea I., 174

S

Sáenz G., 97, 123
 Saiz J. M., 101, 106, 112, 139
 Salazar D., 66
 Salgueirino V., 83
 Salgueiro J. R. , 95, 137
 San Juan J., 174
 San Sebastián M., 74
 Sánchez C., 48
 Sánchez D., 55
 Sánchez J., 46
 Sánchez M.C., 79
 Sánchez M.L., 121
 Sanchez R., 8
 Sánchez-Bayton M., 131
 Sandiumenge F., 21
 Sangiao S., 20, 56
 Santamaría J., 24
 Santos M.J., 206
 Santos P.V., 17
 Sanz J. M., 101
 Sayago F. J., 157
 Sciarrino F., 7
 Sciortino F., 166
 Segade L., 180
 Segura S., 119
 Serrano D., 99
 Serrano I., 56
 Serrano L., 56

Sidrach-de-Cardona M., 114
Solana J. R., 208
Sotillo B., 32
Suñol J.J., 29
Svalov A., 84

T

Taboada P., 62
Tauber J. A., 9
Tejada J., 17, 43, 72
Tena F., 99
Teresa J.M. de, 20, 56
Topete A., 62
Torcal M., 168
Tréguier E., 131
Trenzado J.L., 188, 190, 212, 214
Troncoso J., 201

U

Urbieta A., 34
Urieta J. S., 157, 168, 176, 178, 210
Utrillas M.P., 99, 119

V

Valado M. M., 95
Valdez M. A., 62
Valenzuela S.O., 22
Valerdi-Pérez R. P., 198
Valiente R., 65

Valle García B., 61
Vanacken J., 17
Vásquez C., 76
Vázquez A., 127
Vázquez M., 25
Vega V., 60
Velasco Maillo S., 197
Velasco V. R., 63
Vélez S., 17, 72
Vera Tomé F., 143
Verdejo R., 161
Vila J., 180
Vila M., 81
Vilas J. L., 74
Vozmediano M.A.H., 91

W

White J.A., 206
Williams D., 85
Wyatt P.B., 87

Y

Yedra A., 38
Yzuel M. J., 12

Z

Zarzalejo L., 182
Zarzuela R., 72
Zorrilla-Casanova J., 114 B

PUBliCan



Ediciones

Universidad de Cantabria

Agosto 2011

