

# Contactos, Revista de Educación en Ciencias e Ingeniería



Octubre-Diciembre 2018

ISSN-EN TRÁMITE

No 110

**La física detrás de una imagen médica  
obtenida por Resonancia Magnética**

**La crisis de la supersimetría:  
El ocaso de las teorías de cuerdas**

**Espectroscopia Raman  
de lípidos, proteínas y células**



# Contenido

Contactos, Revista de Educación en Ciencias e Ingeniería

No. 110 Octubre-Diciembre 2018

---

<b>Editorial</b>	3	<i>Espectroscopia Raman de lípidos, proteínas y células</i>	31
		M. Picquart	
<i>Retos y Oportunidades en el Estudio de las Ciencias Atmosféricas en México</i>	5	<i>Cristalinidad y temperatura de fusión de polietileno en la zona de doble fluencia</i>	40
Marco. A. Núñez		Ángel Manzur	
<i>La física detrás de una imagen médica obtenida por Resonancia Magnética</i>	17	<i>Medida, Dimensión y Fractales.</i>	48
S. S Hidalgo-Tobón		José Luis Del Rio-Correa.	
<i>La crisis de la supersimetría: El ocaso de las teorías de cuerdas</i>	24	<i>Sistemas de almacenamiento de energía y el uso de biopolímeros electrolitos</i>	61
Alfredo Macías		Judith Cardoso, Dora Nava y Gregorio Guzmán	

**Contactos, Revista de Educación en Ciencias e Ingeniería**  
en la WEB

Lea los artículos publicados en

<http://www2.izt.uam.mx/contactos/>



*Rector General*

Dr. Eduardo Abel Peñalosa Castro.

*Secretario General*

Dr. José Antonio de los Reyes Heredia.

UNIDAD IZTAPALAPA

*Rector*

Dr. Rodrigo Díaz Cruz.

*Secretario*

M. en B. E. Arturo L. Preciado López.

*Director de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería*

Dr. Jesús Alberto Ochoa Tapia.

*Directora de la División de Ciencias Biológicas y de la Salud*

Dra. Sara Lucía Camargo Ricalde.

**Contactos, Revista de Educación en Ciencias e Ingeniería:**

Consejo Editorial: Dr. Rodrigo Díaz Cruz,

M. en B. E. Arturo L. Preciado López,

Dr. Jesús Alberto Ochoa Tapia,

Dra. Sara Lucía Camargo Ricalde.

UAM-Iztapalapa

Editor en jefe: M. C. Alma Edith Martínez Licona.

*Comité Editorial por CBS:*

Dra. Edith Arenas Ríos, Dra. Laura Josefina Pérez Flores, Dr. Pedro Luis Valverde Padilla.

*Por CBI:*

Dr. Hugo Ávila Paredes.

Por la Universidad Iberoamericana : Mtro. Adolfo

G. Fink-Pastrana.

**CONTACTOS, REVISTA DE EDUCACIÓN EN CIENCIAS E INGENIERÍA. 3ª Época, No. 110,** Octubre

- Diciembre 2018, es una publicación trimestral de la Universidad Autónoma Metropolitana a través de la Unidad Iztapalapa, División de Ciencias Básicas e Ingeniería y División de Ciencias Biológicas y de la Salud. Prolongación Canal de Miramontes 3855, Col. Ex-Hacienda San Juan de Dios, Alcaldía Tlalpan, C.P. 14387, México, Ciudad de México y Av. San Rafael Atlixco No. 186, Edificio T174, Col. Vicentina, Alcaldía Iztapalapa, C.P. 09340, México, Ciudad de México, Tel. 5804-4634 Página electrónica de la revista: <http://www2.izt.uam.mx/contactos/> y dirección electrónica: [cts@xanum.uam.mx](mailto:cts@xanum.uam.mx). Editora Responsable MC Alma E. Martínez Licona. Certificado de Reserva de Derechos al Uso Exclusivo de Título No. 04-2013-042212044000-203, ISSN en trámite, ambos otorgados por el Instituto Nacional del Derecho de Autor. Responsable de la última actualización de este número, Mtra. Alma E. Martínez Licona; Unidad Iztapalapa, División de CBI y CBS; fecha de última modificación: 30 de Diciembre de 2018. Tamaño del archivo 110MB.

Las opiniones expresadas por los autores no necesariamente reflejan la postura del editor de la publicación.

Queda estrictamente prohibida la reproducción total o parcial de los contenidos e imágenes de la publicación sin previa autorización de la Universidad Autónoma Metropolitana.

Fecha de Publicación: Octubre-Diciembre de 2018.

Los artículos publicados en “**Contactos, Revista de Educación en Ciencias e Ingeniería**” son sometidos a arbitraje; para ello se requiere enviar el original del trabajo en algún procesador de texto a doble espacio, dos copias claras del mismo y un archivo del artículo. Toda correspondencia deberá enviarse a:

Comité Editorial de **Contactos, Revista de Educación en Ciencias e Ingeniería,**

UAM-Iztapalapa, T-174, Tel. 5804-4634

Av. San Rafael Atlixco No. 186, C.P. 09340, CDMX.

apartado postal 55-534

<http://www2.izt.uam.mx/contactos/> e-mail [cts@xanum.uam.mx](mailto:cts@xanum.uam.mx)

# Editorial

Para el autor de estas líneas en un placer y un honor presentar estos dos número especiales que con motivo de los 45 años de nuestra institución la Revista ContactoS dedica al Departamento de Física de la UAM-Iztapalpa.

Los orígenes de nuestro Departamento se remontan a la gestación misma de la Universidad cuando, desde principios de 1974, un grupo de entusiastas profesores se da a la tarea de dar forma a la organización académica de lo que sería el Departamento de Física y Química, además de los planes y programas de estudio de las Licenciaturas en Física y Química.

Así, en Septiembre del 1974, cuando inician las actividades académicas de la Universidad Autónoma Metropolitana y entra en funcionamiento la Unidad Iztapalapa, con ella nace la actividad docente y de investigación en Física en nuestra institución.

En el año de 1976 los Profesores asociados al Departamento de Física y Química emprenden caminos independientes, creando de manera separada el Departamento de Física y el Departamento de Química. En este aniversario podemos afirmar sin lugar a duda que la Docencia y la Investigación en el Departamento de Física de la UAM-I es un referente obligado de la Ciencia que se hace México.

Nuestro Departamento esta dividido en ocho Áreas de Investigación: Física de Líquidos, de Sistemas Complejos, Teórica, Gravitación y Cosmología, Fenómenos Ópticos y Transporte en la Materia, Mecánica, Polímeros y Mecánica Estadística.

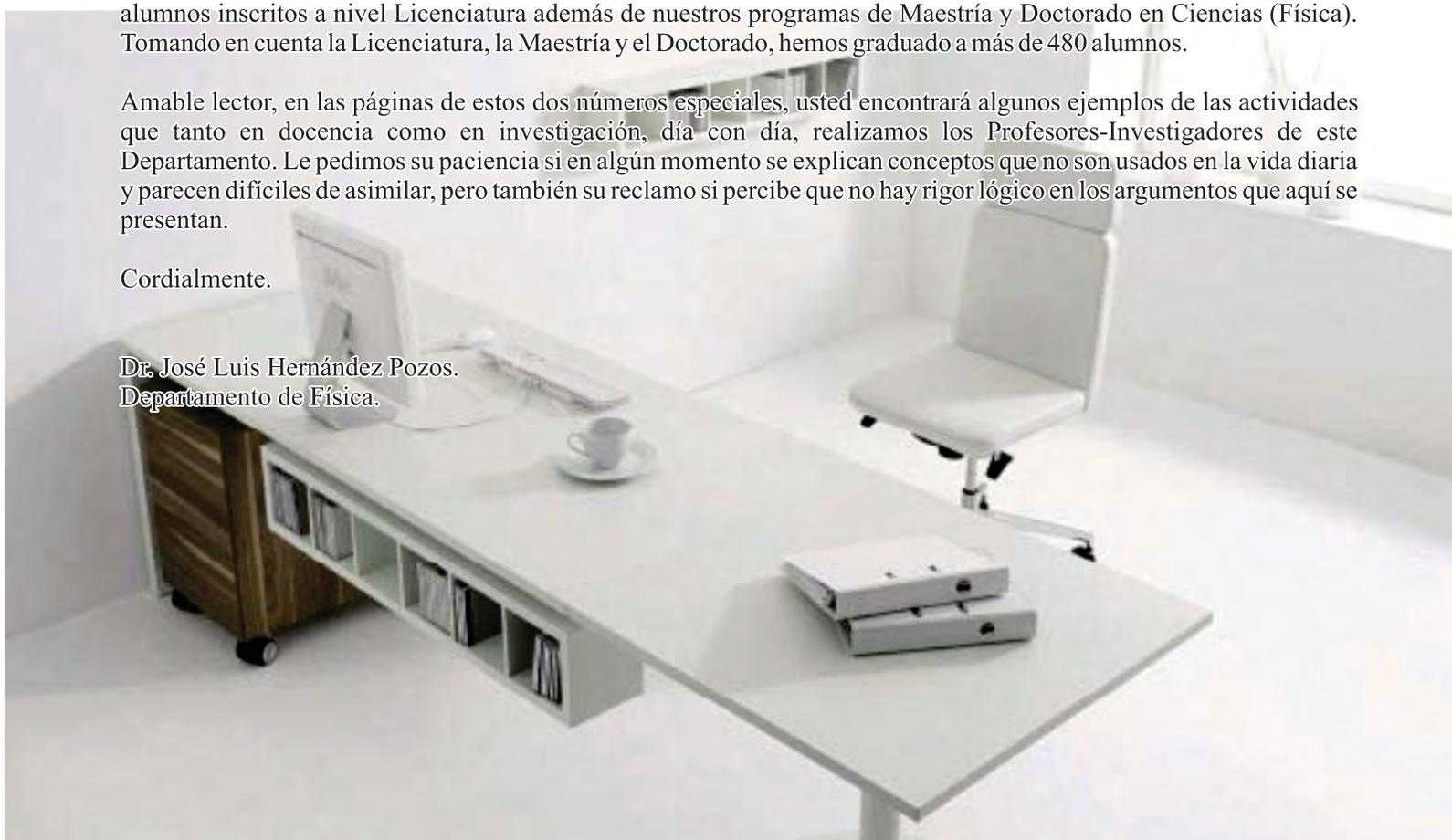
En estas áreas se cultivan temas que cubren tanto el estudio del macro como del microcosmos; que van desde las propiedades de la materia estudiando solo sus constituyentes fundamentales así como también las propiedades emergentes que surgen cuando entidades individuales (átomos, moléculas, entes biológicos) interactúan entre sí. Se realizan actividades teóricas, experimentales y de simulación que requieren una enorme capacidad de procesamiento de datos. Se realizan estudios tanto de ciencia fundamental como aplicada.....respecto a este punto.....¿se puede estrictamente separar la ciencia “pura” de la “aplicada”?.

La primera generación de estudiantes de Física consistió de 7 alumnos. Para finales del 2014 contamos con mas de 500 alumnos inscritos a nivel Licenciatura además de nuestros programas de Maestría y Doctorado en Ciencias (Física). Tomando en cuenta la Licenciatura, la Maestría y el Doctorado, hemos graduado a más de 480 alumnos.

Amable lector, en las páginas de estos dos números especiales, usted encontrará algunos ejemplos de las actividades que tanto en docencia como en investigación, día con día, realizamos los Profesores-Investigadores de este Departamento. Le pedimos su paciencia si en algún momento se explican conceptos que no son usados en la vida diaria y parecen difíciles de asimilar, pero también su reclamo si percibe que no hay rigor lógico en los argumentos que aquí se presentan.

Cordialmente.

Dr. José Luis Hernández Pozos.  
Departamento de Física.



## Información para autores

**Contactos, Revista de Educación en Ciencias e Ingeniería,** Revista dirigida a profesores y a estudiantes de éstas disciplinas.

Está registrada en el índice de revistas de divulgación de Conacyt, así como en Latindex, Sistema Regional de Información en Línea para Revistas Científicas de América Latina, el Caribe, España y Portugal.

Para publicar, los trabajos deberán ser originales y accesibles a un público amplio con formación media superior o universitaria pero no especializada; los temas deberán presentarse en forma clara. Cada colaboración debe incluir figuras, diagramas, ilustraciones, fotografías, etc. (otorgando el crédito correspondiente en caso de no ser original), que hagan más accesible la presentación.

**Las secciones que la constituyen son;**

**1. Divulgación.** Artículos que presentan temas científicos con enfoques novedosos y accesibles (15 cuartillas).

**2. Educación Científica.** Enfoques originales en la enseñanza de temas particulares (15 cuartillas).

**3. Artículos Especializados.** Reportes breves de investigación, relacionados con una problemática concreta (15 cuartillas).

**4. Crónicas.** Historia y desarrollo de conceptos científicos, así como teorías alternativas (15 cuartillas).

**5. Divertimentos.** Juegos y acertijos intelectuales (5 cuartillas).

**6. Noticias breves.** Información de actualidad en el mundo de la ciencia (4 cuartillas).

**7. Los laureles de olivo.** Los absurdos de la vida cotidiana y académica (4 cuartillas).

En todos los casos se debe incluir los nombres completos de los autores con su adscripción, dirección, teléfono y dirección de correo electrónico.

### Normas

Las colaboraciones en las secciones 1 a 4 deberán ajustarse a las siguientes normas:

1. Resumen escrito en español e inglés.
2. 4 palabras clave en español e inglés.
3. Cuando se incluya una abreviatura debe explicarse por una sola vez en la forma siguiente: Organización de los Estados Americanos (OEA)...
4. Cuando se utilice un nombre técnico o una palabra característica de una disciplina científica deberá aclararse su significado de la manera más sencilla posible.
5. Las citas textuales deberán ir de acuerdo al siguiente ejemplo: En cuanto a la publicación del placebo se asevera que "el efecto placebo desapareció cuando los comportamientos se estudiaron en esta forma"(Núñez, 1982, p. 126).

6. Las referencias (no más de 10) se marcarán de acuerdo al siguiente ejemplo: Sin embargo, ese no es el punto de vista de la Escuela de Copenhague (Heisenberg, 1958), que insiste en...

7. Al final del artículo se citarán las referencias por orden alfabético de autores. Pueden añadirse lecturas recomendadas (no más de 5).

8. Cada referencia a un artículo debe ajustarse al siguiente formato: Szabadvary, F. y Oesper, E., Development of the pH concept, *J. Chem. Educ.*, 41 [2], pp.105-107, 1964.

9. Cada referencia a un libro se ajustará al siguiente formato: Heisenberg, W., *Physics and Philosophy. The Revolution in Modern Science*, Harper Torchbooks, Nueva York, pp.44-58, 1958.

10. Para páginas electrónicas: dirección (fecha de acceso).

11. Los títulos de reportes, memorias, etcétera, deben subrayados o en itálicas.

### Envío y características del artículo

El envío del artículo deberá ser en archivo electrónico, ya sea en WORD o TEX, tipo de letra Times New Roman, tamaño 12 con interlineado sencillo y uso de editor de ecuaciones.

En el caso de ilustraciones por computadora (BMP, JPG, TIFF, etc.) envíelos en archivos por separado.

El material es recibido en:

Contactos, Revista de Educación en Ciencias e Ingeniería.  
UAM-Iztapalapa, T-174,  
información: cts@xanum.uam.mx, tel. 5804-4634.  
S.Rafael Atlixco 186, C.P. 09340,  
CDMX. A.P. 55-534.

### Arbitraje

El Comité Editorial utiliza un sistema de arbitraje anónimo que requiere un mes. Se entiende que los autores no han enviado su artículo a otra revista y que dispondrán de un plazo máximo de un mes para incorporar las observaciones de los árbitros.

Una vez aceptado el artículo para su publicación, los autores deberán depositar una cuota de recuperación de \$ 80.00 pesos por ejemplar a las siguientes cuentas: Banamex, suc. 329, cta 4324223. CLABE 0021 8003 2943 2422 35.

En la UAM dos formas de pago:

1. Transferencia a la clave presupuestal: 1212105-40
2. Por depósito en caja de la unidad a la siguiente clave: IEVE201400071

La decisión final de publicar un artículo es responsabilidad exclusiva del Comité Editorial.

A satellite view of Earth at night, showing the curvature of the planet and the glowing atmosphere. The landmasses are dark, with numerous bright yellow and orange lights representing cities and urban areas. The ocean is dark blue. The horizon line is visible, showing the thin blue layer of the atmosphere.

# **Retos y Oportunidades en el Estudio de las Ciencias Atmosféricas en México**

**Marco. A. Núñez**  
**Departamento de Física,**  
**Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa**

## Resumen

En este trabajo damos un panorama de las enormes necesidades nacionales de contar con recursos humanos debidamente preparados en ciencias atmosféricas y lo que son éstas últimas. Reportamos resultados de investigación sobre tres problemas de interés meteorológico: (a) La importancia del balance de masa de un campo de velocidad atmosférico para modelos de transporte de contaminantes atmosféricas, (b) un método para estimar campos de velocidad que conserva la masa con alta precisión, y (c) el rango de validez espacial limitado de algunos modelos computacionales de pronóstico usados en México y el extranjero. Las aplicaciones de la investigación en ciencias atmosféricas en otras áreas como la hidrología, la oceanografía, la mecánica de fluidos en general, y la física médica, se describen brevemente.

## 1. Introducción

La comprensión de la dinámica atmosférica es un problema importante para instituciones nacionales, públicas y privadas, con carácter federal y estatal, porque los fenómenos atmosféricos tienen un impacto directo en áreas de seguridad nacional, entendiéndose por éstas, las vinculadas con la integridad del territorio nacional y su población en el corto y largo plazo, como son: (a) Protección civil ante desastres provocados por fenómenos hidrometeorológicos como tormentas severas o huracanes; (b) la agricultura, ganadería y seguridad nacional alimentaria ante sequías; (c) la ecología, el ordenamiento territorial y la administración sustentable de recursos; (d) las comunicaciones aéreas, marítimas y terrestres; (e) el sector energético, el diseño y construcción y generación de energía por medio de fuentes renovables; (f) el sector salud y la seguridad hídrica. La importancia de los fenómenos atmosféricos contrasta con la poca oferta de planes de estudio a nivel de licenciatura y posgrado en ciencias atmosféricas en México. En este trabajo damos un panorama de las necesidades y oportunidades laborales en México (sección 2), lo que son las ciencias atmosféricas (sección 3), el importante problema operacional de asimilación de datos (sección 4), y de la necesidad de revisar y profundizar en el desarrollo de métodos de asimilación y modelos teóricos, por medio de resultados de investigación en el departamento de física de la universidad autónoma metropolitana, unidad iztapalapa, sobre tres problemas de interés

operacional: la importancia de generar campos de velocidad atmosféricos que conserven la masa (sección 5), cómo pueden mejorarse los métodos para estimar dichos campos (sección 6), y las limitaciones que tienen modelos de meso escala atmosféricos por medio de soluciones lagrangianas de la ecuación de movimiento (sección 7). Las relaciones con áreas como la hidrología, oceanografía, la mecánica de fluidos experimental, la física médica, se indican a lo largo del trabajo.

## 2. Demanda nacional de profesionales en ciencias atmosféricas

Los cambios en el clima terrestre ha generado un esfuerzo internacional importante por entender los diferentes procesos físicos, químicos y biológicos involucrados, con el propósito de implementar las políticas apropiadas para reducir los efectos adversos y garantizar el desarrollo sustentable de la humanidad [1]. En el ámbito nacional, esto ha motivado la implementación de políticas en diferentes niveles de gobierno, así como la actualización de la legislación en los niveles federal y estatal, para tratar de enfrentar los efectos del cambio climático. Por ejemplo, en enero de este año, el presidente de la República anunció la autorización a la Comisión Nacional del Agua (CONAGUA) de un presupuesto de 50 mil millones de pesos para mejorar la infraestructura y afrontar el cambio climático. Este presupuesto incluye 170 millones de dólares para modernizar el servicio meteorológico nacional [2]. Desafortunadamente, como veremos abajo, el esfuerzo institucional carece de una oferta educativa nacional apropiada para formar los recursos humanos especializados en ciencias atmosféricas que se requieren.

El Servicio Meteorológico Nacional de México (SMN), con el apoyo de la Organización Meteorológica Mundial (OMM), realizó un estudio [3] sobre el grado de especialización en ciencias atmosféricas de quienes laboran en el SMN y la oferta laboral nacional, que podemos resumir como sigue: (a) Los grupos que generan la información climática no cuentan con especialistas cuya formación académica parta de estudios en la ciencia del clima. Se trata, en el mejor de los casos, de especialistas en algunos campos de la ciencia relacionados con la geografía, la ingeniería o las disciplinas ambientales. (b) Es notable la ausencia total de una unidad responsable de la formación en

meteorología y climatología y de la capacitación profesional para desempeñar las diferentes tareas específicas de los puestos de trabajo del SMN. La dotación actual de recursos humanos del SMN es insuficiente en número y en calificación profesional, para poder cumplir con las tareas propias de un servicio meteorológico nacional. (c) En el mercado laboral no existe el número necesario de personas con la calificación requerida en meteorología y climatología, para ser contratadas e incorporadas de forma inmediata y suplir las necesidades del SMN. Por lo que es prioritario definir una política de formación en meteorología y clima de amplio alcance, a mediano y largo plazo. Destaca la carencia en el SMN de científicos de alto nivel académico para el desarrollo de investigación aplicada y mantener una cooperación activa con universidades e instituciones especializadas en los campos relacionados.

Para tener una idea del número necesario de licenciados en ciencias atmosféricas que necesita México, podemos decir que parte del presupuesto aprobado para modernizar el SMN, se destinará a la contratación de aproximadamente 400 profesionales en ciencias atmosféricas en los próximos cuatro años para crear once centros regionales dedicados al análisis y pronóstico meteorológico y la agencia nacional de huracanes y tormentas severas [4].

### 3. Un panorama breve de las ciencias atmosféricas

El clima de la Tierra está determinado por la interacción de los principales sistemas terrestres, a saber, la atmósfera, la hidrósfera, la criósfera, la litósfera, y la biósfera [5]. La dinámica de cada uno de estos sistemas es extremadamente compleja porque sus diferentes subsistemas interactúan en forma no lineal y en un amplio intervalo de escalas espaciales y temporales. Por lo que el estudio integral del clima requiere de profesionales dedicados al análisis de cada sistema y de sus relaciones con los demás sistemas terrestres. Por la enorme diversidad de escalas espaciales y temporales de los procesos atmosféricos podemos decir que la atmósfera es el más dinámico de los sistemas que componen a la Tierra.

Las ciencias atmosféricas estudian las leyes y procesos fisicoquímicos que explican los fenómenos atmosféricos relacionados con el tiempo y clima

tales como tormentas, huracanes, tornados y sequías, así como su aplicación al estudio de sus efectos, en el corto y largo plazo, en la agricultura, las comunicaciones, el manejo sustentable de recursos, la salud pública, entre otros. De acuerdo con la Organización Meteorológica Mundial [5] los términos *ciencias atmosféricas* y *meteorología* tienen el mismo significado. En lo que sigue usaremos el término meteorología por brevedad. A continuación daremos una breve visión de las ciencias y disciplinas meteorológicas, las cuales se distinguen para facilitar el diseño de planes de estudio, más que para diferenciar dichas disciplinas.

El estudio de los procesos atmosféricos requiere conocimientos de física, química, matemáticas y computación, que se adquieren en los dos primeros años de la licenciatura de física. Los temas requeridos en matemáticas son: Álgebra lineal, cálculo vectorial, ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales, probabilidad y estadística, y métodos numéricos. Los temas en física son: Mecánica clásica de partículas y sistemas de partículas, termodinámica, teoría ondulatoria, mecánicas de fluidos, teoría electromagnética y fundamentos de mecánica cuántica. Los temas en química son: fisicoquímica básica, termodinámica química, soluciones acuosas y fotoquímica introductoria.

Las disciplinas que integran las ciencias atmosféricas son las siguientes [5]:

*Meteorología física.* Trata de explicar los fenómenos atmosféricos por medio de un conocimiento de los principios físicos básicos de la mecánica (clásica y cuántica), la termodinámica y la teoría electromagnética. Estas áreas dan las bases necesarias para el estudio de temas tales como la estructura física y composición química de la atmósfera, la radiación solar y terrestre, la física y química de los aerosoles, los procesos de la capa límite, la microfísica de nubes y la precipitación, la electricidad atmosférica, los procesos a pequeña escala como la turbulencia, las bases de la tecnología del sondeo remoto de la atmósfera, y la contaminación atmosférica. *Meteorología dinámica.* Estudia los movimientos atmosféricos como soluciones de las ecuaciones fundamentales de hidrodinámica y termodinámica u otros sistemas de ecuaciones apropiadas para situaciones

especiales, como en el caso de la teoría estadística de turbulencia. Es necesario una sólida formación en matemáticas y dinámica de fluidos, lo que da una base científica para la comprensión del rol físico de los movimientos atmosféricos en la determinación del tiempo y el clima en todas las escalas (la planetaria, la sinóptica, de meso escala y micro escala). Este conocimiento es fundamental para el desarrollo de métodos prácticos de pronóstico numérico del tiempo y el clima.

*Meteorología sinóptica.* Estudia la información del tiempo para diagnosticar la estructura atmosférica y anticipar su evolución futura. Este análisis considera regiones de decenas de kilómetros hasta la escala planetaria y e incorpora métodos sofisticados para analizar bases de datos operacionales, conjuntos estandarizados de mapas y diagramas de diagnósticos meteorológicos hechos automáticamente, resultados de pronóstico numérico del tiempo, y herramientas de sondeo remoto como imágenes de satélite y radares. *Climatología.* La climatología tradicional estudia el estado físico promedio de la atmósfera con sus variaciones estadísticas en espacio y tiempo en un período de muchos años. Sin embargo, se ha reconocido que el sistema climático debe incluir otros componentes del sistema Tierra, por lo que la climatología actual estudia tanto procesos meteorológicos, como procesos físicos y químicos en los océanos y a lo largo y ancho de la gran diversidad de regímenes de terrenos en la superficie del planeta. La integración de datos y conocimiento de la atmósfera, oceanografía e hidrología se hace esencial. El clima es visto como la estadística a largo plazo que describe el sistema acoplado atmósfera-océano-tierra, promediado sobre un período de tiempo apropiado. El análisis de la evolución del sistema tierra ha dado a la climatología moderna un alcance mayor al definir métodos que permitan estudiar los cambios potenciales el clima global y regional por la acciones de las actividades humanas al modificar significativamente las concentraciones de gases de invernadero y los aerosoles en la atmósfera y los patrones de la cobertura vegetal del planeta.

#### 4. Asimilación de datos: un problema fundamental en meteorología y otras áreas

La dinámica atmosférica desde la escala planetaria hasta la micro escala se estudia por medio de las

ecuaciones de movimiento, continuidad, energía termodinámica y la ecuación de estado de gas ideal [6]-[9],

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p - 2\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{v} + \mathbf{g} + \mathbf{f} \quad (4.1)$$

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho\nabla \cdot \mathbf{v} = Q_\rho \quad (4.2)$$

$$\frac{d\theta}{dt} = Q_\theta, \quad \theta \equiv T_v (p_{00}/p)^{R_d/C_p}, \quad (4.3)$$

$$p = RT_v\rho \quad (4.4)$$

donde  $\mathbf{v}$ ,  $\rho$ ,  $p$ , son la velocidad, densidad y presión atmosférica,  $\mathbf{g}$  y  $\boldsymbol{\Omega}$  son la aceleración gravitacional y velocidad de rotación de la Tierra,  $\mathbf{f}$  es la resultante de fuerzas adicionales a la gravedad,  $\theta$  es la llamada temperatura potencial,  $T_v = (1 + 0.6q) T$ ,  $q$  y  $T$  son la temperatura virtual, la humedad específica del vapor de agua y la temperatura termodinámica, respectivamente,  $p_{00}$  es una presión de referencia,  $R_d$  y  $C_p$  son la constante de gas y  $C_p$  capacidad calorífica de la atmósfera seca,  $Q_\rho$  y  $Q_\theta$  cuantifican las fuentes y sumideros de masa y energía. La forma euleriana de las ecuaciones (4.1) - (4.4) se obtiene sustituyendo el lado derecho de la relación siguiente

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla.$$

El estudio de la dinámica atmosférica no se reduce a la solución de las ecuaciones hidrodinámicas (4.1)-(4.4).

Un problema operacional fundamental es *la estimación del estado de la atmósfera con tanta precisión como sea posible en instante  $t_0$*  [10], [11]. En la práctica esto equivale a obtener una estimación espacial de  $\rho$ ,  $p$ ,  $T$ ,  $\theta$ ,  $\mathbf{v}$ , en un instante  $t_0$ , a partir de los datos medidos a escala planetaria por redes meteorológicas, las cuales incluyen radares y satélites meteorológicos, y datos estimados con modelos numéricos de pronóstico.

Este problema se denomina *asimilación de datos atmosféricos* y constituye una de las áreas de investigación más activas a nivel internacional, por su complejidad matemática y computacional e importancia operacional. El énfasis en la precisión se debe a los resultados de Lorenz [12], [13], quien demostró que las ecuaciones hidrodinámicas (4.1) - (4.4) tienen soluciones altamente sensibles a las condiciones iniciales, de manera que una pequeña perturbación en los datos del problema puede dar soluciones completamente diferentes en un intervalo de tiempo relativamente pequeño. Este resultado y otros similares son la base de la teoría del caos la cual

establece un límite a la capacidad de modelos deterministas para predecir la evolución temporal y espacial de un sistema [14].

Las dimensiones de la atmósfera hacen imposible tener una medición en un instante  $t_0$  de cada variable en una malla espacial con alta resolución, por lo que estas mediciones se complementan con las estimaciones de modelos numéricos al tiempo  $t_0$ . La integración de esta información no se reduce a la interpolación de los datos, el proceso de asimilación de datos debe dar variables atmosféricas  $p_0(t_0, \mathbf{r})$ ,  $p_0(t_0, \mathbf{r})$ ,  $T_0(t_0, \mathbf{r})$ ,  $\theta_0(t_0, \mathbf{r})$ ,  $\mathbf{v}_0(t_0, \mathbf{r})$ , que sean congruentes con las ecuaciones hidrodinámicas. Habiendo obtenido una estimación al tiempo  $t_0$  de cada variable, el paso siguiente es la solución de las ecuaciones (4.1)-(4.4) para obtener una estimación en un tiempo  $t_1$ , y el proceso se repite, las estimaciones numéricas en  $t_1$  se usan para complementar los datos medidos hasta dicho instante y obtener nuevas estimaciones  $p_0(t_1, \mathbf{r})$ ,  $p_0(t_1, \mathbf{r})$ ,  $T_0(t_1, \mathbf{r})$ ,  $\theta_0(t_1, \mathbf{r})$ ,  $\mathbf{v}_0(t_1, \mathbf{r})$ , con las cuales se resuelven nuevamente las ecuaciones hidrodinámicas, y así sucesivamente. A este proceso se le denomina asimilación de datos intermitente o en 4D, por integrar información espacial (3D) y temporal (1D) cada 6 horas en los principales centros de análisis meteorológico. Las áreas de las matemáticas y computación involucradas son la teoría de sistemas dinámicos no lineales, problemas inversos y control de sistemas distribuidos, procesos estocásticos, la minería de datos y la integración de la red global de medición de datos meteorológicos [10], [11]. La teoría de procesos estocásticos merece especial mención por dar un camino para tratar con la incertidumbre presente en todo el proceso de modelación atmosférica, desde los errores en los datos hasta los límites de predictibilidad impuestos por las soluciones caóticas de las ecuaciones (4.1)-(4.4).

La asimilación de datos no es un problema exclusivo de la meteorología, este problema aparece en todas las ciencias por que el estudio en tiempo o espacio de cualquier sistema requiere de un análisis de la información disponible en la mejor forma posible, lo que puede apoyarse en modelos matemáticos deterministas o estocásticos que establecen relaciones básicas entre las variables del sistema de interés.

Esta es la idea de, por ejemplo, los filtros del Kalman [10], [11], los cuales tratan de hacer un uso óptimo de los datos disponibles de un sistema gobernado por ecuaciones de evolución como la segunda ley, las ecuaciones hidrodinámicas, o sus versiones discretas. Por lo que el estudio de métodos de asimilación de datos atmosféricos da un camino para desarrollar métodos de análisis de información en otras áreas de las ciencias básicas y la ingeniería, las ciencias sociales y biológicas.

El desarrollo de métodos de asimilación se complementa con el desarrollo permanente de modelos físicos, químicos y matemáticos apropiados para el estudio de los fenómenos atmosféricos en sus diferentes escalas espaciales y temporales. Por ejemplo, la caracterización y modelación de la turbulencia es un problema de frontera tanto en la meteorología como en la mecánica de fluidos en general. La dinámica molecular y la física estadística están aportando resultados que permiten comprender mejor el papel que juegan los aerosoles en la formación de nubes [15]. En las secciones siguientes daremos un panorama breve de los problemas de asimilación de datos y la necesidad de seguir revisando y mejorando los modelos teóricos para el diagnóstico y pronóstico meteorológico en diferentes escalas espaciales.

### 5. Importancia del balance de masa en modelos de transporte atmosférico

Una aplicación importante del campo de velocidad estimado a partir de datos operacionales, es el estudio del transporte de contaminantes atmosféricos [16]. El modelo principal para estudiar el transporte, difusión y transformación, de sustancias en la atmósfera es

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}c_i) = \nabla \cdot (\mathbf{K}_i \cdot \nabla c) + R_i(t, c_1, \dots, c_n) \quad (5.1)$$

donde  $c_i$  es la concentración de la  $i$ -ésima especie,  $\mathbf{K}_i$  es el tensor de difusión, y  $R_i$  mide las variaciones de  $c_i$  por reacciones químicas [15]. Una aproximación común de la ecuación de continuidad (4.2) es

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (5.2)$$

con la cual la ecuación (5.1) toma la forma que resuelven la mayoría de los modelos de transporte [15], [17], a saber,

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c_i = \nabla \cdot (\mathbf{K}_i \nabla c_i) + R_i . \quad (5.3)$$

El problema operacional es que en un instante  $t$  sólo se dispone de un número finito de datos

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}_1), \mathbf{v}(\mathbf{r}_2), \mathbf{v}(\mathbf{r}_3), \dots, \mathbf{v}(\mathbf{r}_N) , \quad (5.4)$$

en puntos  $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$ , sobre una malla irregular. De acuerdo con Kitada [18] los métodos para estimar  $\mathbf{v}$  a partir de tales datos dan un campo  $\mathbf{v}^\delta$  con divergencia  $\nabla \cdot \mathbf{v}^\delta$  del orden de  $\pm 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ ;  $\delta$  da la divergencia como sigue

$$\delta = \frac{1}{2} \nabla \cdot \mathbf{v}^\delta . \quad (5.5)$$

Consideremos la ecuación (5.1) con un campo  $\mathbf{v}^\delta$

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}^\delta c_i) = \nabla \cdot (\mathbf{K}_i \nabla c_i) + R_i .$$

Reescribiendo

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \mathbf{v}^\delta \cdot \nabla c_i = - (\nabla \cdot \mathbf{v}^\delta) c_i + \nabla \cdot (\mathbf{K}_i \nabla c_i) + R_i . \quad (5.6)$$

vemos que el término  $- (\nabla \cdot \mathbf{v}^\delta) c_i$  introduce una reacción ficticia de primer orden que varia la concentración  $c_i$ . Con una divergencia  $\nabla \cdot \mathbf{v}^\delta$  de orden  $\pm 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ , este término es mayor por un orden de magnitud que el decaimiento natural de sustancias radiactivas (de orden  $10^{-6} \text{ s}^{-1}$ ). La solución propuesta por Kitada y otros autores que han desarrollado códigos computacionales operacionales para resolver (5.1) [15], [19], [20], es ignorar el término  $- (\nabla \cdot \mathbf{v}^\delta) c_i$  y considerar la ecuación

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \mathbf{v}^\delta \cdot \nabla c_i = \nabla \cdot (\mathbf{K}_i \nabla c_i) + R_i . \quad (5.7)$$

El problema con esta solución está en que la estructura de  $\mathbf{v}^\delta$  puede diferir substancialmente de la de un campo no divergente  $\mathbf{v}^{\delta=0}$ . Este problema de inestabilidad estructural ha sido estudiado recientemente en un trabajo de investigación [21] del cual obtenemos los resultados siguientes.

Dado que a gran escala el movimiento vertical de la atmósfera es despreciable comparado con el horizontal, consideremos el campo de velocidad

$$\mathbf{v}^\delta(\mathbf{r}) = u^\delta(\mathbf{r}) \mathbf{i} + v^\delta(\mathbf{r}) \mathbf{j} . \quad (5.8)$$

Para conocer la estructura de  $\mathbf{v}^\delta$  en la vecindad de un punto arbitrario  $\mathbf{r}_{00}$  (que por simplicidad consideramos en el origen  $\mathbf{r}_{00} = \mathbf{0}$ ), desarrollamos  $\mathbf{v}^\delta$  en serie de Taylor alrededor de  $\mathbf{r}_{00}$ . El resultado es

$$\begin{pmatrix} u^\delta \\ v^\delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b - \omega \\ b + \omega & -a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \delta \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} u_{00} \\ v_{00} \end{pmatrix} \quad (5.9)$$

donde usamos  $\delta$  (5.5) y los parámetros hidrodinámicos

$$\omega = \mathbf{k} \cdot \nabla \times \mathbf{v}^\delta / 2, \quad a = (\partial_x u^\delta - \partial_y v^\delta) / 2, \quad b = (\partial_y u^\delta + \partial_x v^\delta) / 2, \quad (5.10)$$

para representar al gradiente de velocidad  $\nabla \mathbf{v}^\delta$  en el punto  $\mathbf{r}_{00}$ . De acuerdo con (5.9)  $\mathbf{v}^\delta$  tiene la forma

$$\mathbf{v}^\delta = \mathbf{v}^{\delta=0} + \mathbf{u}^\delta + \mathbf{v}_{00}$$

donde  $\mathbf{v}^{\delta=0}$  es la parte no divergente y  $\mathbf{u}^\delta = \delta \mathbf{r}$  es una perturbación divergente de  $\mathbf{v}^{\delta=0}$ . La estructura del campo  $\mathbf{v}^\delta$  está determinada por el discriminante  $d^\delta = a^2 + b^2 - \omega^2$  de la ecuación de eigenvalores de  $\nabla \mathbf{v}^\delta$ . Los eigenvalores,  $\lambda_1^\delta = \delta + \sqrt{d^\delta}$ ,  $\lambda_2^\delta = \delta - \sqrt{d^\delta}$  muestran que el campo no divergente  $\mathbf{v}^{\delta=0}$  tiene básicamente dos estructuras: elíptica ( $d^\delta < 0$ ) o hiperbólica ( $d^\delta > 0$ ), y la perturbación de  $\mathbf{v}^{\delta=0}$  con  $\mathbf{u}^{\delta \neq 0}$  puede dar lugar flujos parabólicos. Veamos los resultados posibles con valores de flujos atmosféricos de gran escala.

Definamos el valor característico de una variable  $f(x, y)$  en una región  $R = \{(x, y) : |x|, |y| \leq L\}$  como su valor promedio  $\bar{f}$  en dicha región. Consideremos por simplicidad  $u_{00} = v_{00} = 0$ . De acuerdo con (5.9) la relación entre los valores medios  $\bar{x} = \bar{y} = L/2$ ,  $\bar{u}$ ,  $\bar{v}$ , y los parámetros (5.10),

$$\bar{u} = (\delta + a) \bar{x} + (b - \omega) \bar{y}, \quad \bar{v} = (b + \omega) \bar{x} + (\delta - a) \bar{y}$$

determina los valores de  $a$  y  $b$  en términos de  $\delta$ ,  $w$ ,  $\bar{u}$ ,  $\bar{v}$ :  $a = \alpha / 2 \bar{x} + w$ ,  $b = \beta / 2 \bar{x} - \delta$ , donde definimos  $\alpha \equiv \bar{u} - \bar{v}$ ,  $\beta \equiv \bar{u} + \bar{v}$ . Los valores característicos de flujos con una escala  $L = 10^3 \text{ km}$  son  $\bar{u}$ ,  $\bar{v} \sim \pm 10 \text{ ms}^{-1}$  y  $\delta$ ,  $\omega \sim \pm 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ . Como ejemplo, consideremos  $\delta = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ ,  $\beta = 10$ ,  $\alpha = 1 \text{ ms}^{-1}$ . Con estos parámetros el flujo  $\mathbf{v}^{\delta=0}$  (5.9) es hiperbólico mientras que el flujo perturbado  $\mathbf{v}^{\delta \neq 0}$  es elíptico para valores de  $\omega$  en el intervalo  $I_{\alpha\beta} = (\omega_c^0, \omega_c^\delta)$  determinado por

$$\omega_c^0 \equiv -(\alpha^2 + \beta^2) / 4\alpha \bar{x}, \quad \omega_c^\delta \equiv \omega_0^\delta - q \bar{x} / \alpha, \quad q \equiv \delta(\delta - \beta / \bar{x}) .$$

La Figura 1 ilustra la diferencia estructural entre  $\mathbf{v}^{\delta=0}$  y  $\mathbf{v}^{\delta \neq 0}$  para  $\omega = -10^{-5} \text{ s}^{-1}$ . Esto demuestra que *no* basta

con ignorar el término  $-(\nabla \cdot \mathbf{v}^\delta) c_i$  en la solución del modelo de transporte (5.7) como se ha propuesto [18], [19], sino que es fundamental trabajar con un campo  $\mathbf{v}^\delta$  cuya divergencia sea tan pequeña como sea posible, para que su estructura sea parecida a la de un campo no divergente  $\mathbf{v}^{\delta=0}$ . Debemos agregar que la estimación considerada por Kitada  $\nabla \cdot \mathbf{v}^\delta \sim \pm 10^{-5} \text{s}^{-1}$  [18] puede ser bastante optimista ya que el uso de métodos variacionales para estimar campos no divergentes puede dar campos  $\mathbf{v}^\delta$  con divergencias del orden de  $\pm 10^{-3} \text{s}^{-1}$  o mayores [22], [23]. En estos casos las diferencias estructurales entre  $\mathbf{v}^{\delta=0}$  y su perturbación  $\mathbf{v}^{\delta \neq 0}$  pueden ser mayores, lo puede explicar en parte las diferencias entre modelos de trayectorias reportadas en la literatura [20].

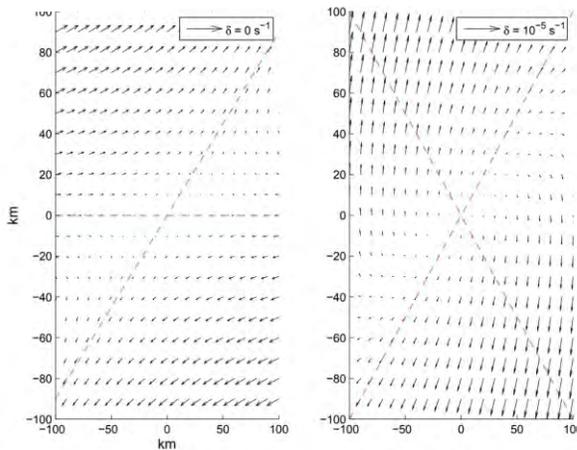


Figure 1: Campo de velocidad no divergente  $\mathbf{v}^{\delta=0}$  con estructura hiperbólica, calculado con valores característicos de flujos atmosféricos con gran escala espacial:  $L = 10^3 \text{ km}$ ,  $\beta = 10$ ,  $\alpha = 1 \text{ ms}^{-1}$ ,  $\omega = -10^{-5} \text{ s}^{-1}$ . Campo divergente  $\mathbf{v}^\delta = \mathbf{v}^{\delta=0} + \mathbf{u}^\delta$  con estructura elíptica, obtenido perturbado a  $\mathbf{v}^{\delta=0}$  con  $\mathbf{u}^\delta = \delta \mathbf{r}$ ,  $\delta = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ . Las líneas punteadas dan las direcciones principales de cada campo de velocidad.

## 6. Un método mejorado para la asimilación variacional de datos de velocidad

La estimación del campo de velocidad de un flujo hidrodinámico a partir de datos medidos en un cierto instante  $t$  en una región finita  $R$  con frontera  $\Gamma$ , es un problema de interés en varias áreas de la mecánica de fluidos como meteorología [11], oceanografía [24], la mecánica de fluidos experimental [25] y la física médica [26]. La primera aproximación a este problema consiste en interpolar un conjunto de datos  $\mathbf{v}(\mathbf{r}_1), \dots, \mathbf{v}(\mathbf{r}_N)$ , por ejemplo, por medio de un promedio de la forma

$$\mathbf{v}^0(\mathbf{r}) = \sum_k f_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}_k) \mathbf{v}(\mathbf{r}_k)$$

donde  $f_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}_k)$  le da mayor peso al dato  $\mathbf{v}(\mathbf{r}_k)$  cuando el punto  $\mathbf{r}$  está más cerca del punto  $\mathbf{r}_k$  donde se mide

el dato [11]. El problema con este tipo de aproximaciones es que el campo interpolado  $\mathbf{v}^0$  no satisface ninguna restricción dinámica ni condiciones a la frontera impuestas por fronteras sólidas. Una forma de ajustar el campo  $\mathbf{v}^0$  fue propuesta por Sasaki en los años 50 del siglo pasado [27] y consiste en calcular el campo  $\mathbf{v}_d$  que minimiza el funcional

$$J(\mathbf{v}_d) = \int_R (\mathbf{v}_d - \mathbf{v}^0) \cdot \mathbb{S}(\mathbf{v}_d - \mathbf{v}^0) dR \quad (6.1)$$

sujeito a restricciones físicas de interés, donde  $\mathbb{S}$  es una matriz simétrica y positiva que generalmente se define como constante. El subíndice  $d$  indica el campo que se ha calculado por más de 30 años [28]-[30] con condiciones de frontera Dirichlet como se explica abajo. Una condición física sobre  $\mathbf{v}_d$  es la ecuación de continuidad en su forma más simple

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_d = 0 \quad \text{en } R \quad (6.2)$$

y, en los casos meteorológicos y oceanográficos, la condición a la frontera

$$\mathbf{v}_d \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{sobre el terreno o fondo marino.} \quad (6.3)$$

donde  $\mathbf{n}$  es el vector normal unitario exterior al terreno. La minimización de  $J(\mathbf{v}_d)$  con las restricciones (6.2), (6.3), da el campo de velocidad

$$\mathbf{v}_d = \mathbf{v}^0 + \mathbb{S}^{-1} \nabla \lambda_d \quad (6.4)$$

donde  $\lambda_d$  es solución de la ecuación

$$-\nabla \cdot \mathbb{S}^{-1} \nabla \lambda_d = \nabla \cdot \mathbf{v}^0 \quad \text{en } R. \quad (6.5)$$

Para obtener una solución única  $\lambda_d$  se ha usado la condición de frontera tipo Dirichlet

$$\lambda_d = 0 \quad \text{en paredes laterales y superior de } R. \quad (6.6)$$

La mejor condición a la frontera está dada por el campo verdadero  $\mathbf{v}_T$

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{v}_T \cdot \mathbf{n} \quad \text{sobre toda la frontera } \Gamma \text{ de } R. \quad (6.7)$$

El problema es que  $\mathbf{v}_T \cdot \mathbf{n}$  no se conoce, excepto en las fronteras sólidas, que en meteorología coinciden con el terreno. La propuesta reportada recientemente [22], [23], es la siguiente. Dado que las redes operacionales meteorológicas sólo miden las componentes horizontales del campo de velocidad, el campo inicial tiene la forma  $\mathbf{v}^0 = u^0 \mathbf{i} + v^0 \mathbf{j}$ . El campo de velocidad más simple que conserva la masa y es tangente al terreno es  $\mathbf{U}^0 = \mathbf{v}^0 + w^0 \mathbf{k}$  donde la velocidad vertical  $w^0$  se obtiene imponiendo a  $\mathbf{U}^0$  las restricciones físicas

$$\nabla \cdot \mathbf{U}^0 = 0 \text{ en } R, \quad \mathbf{U}^0 \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ sobre el terreno. (6.8)}$$

la cuales constituyen una ecuación diferencial ordinaria sujeta a una condición de frontera que determina unívocamente a  $\omega^0$ . El campo de velocidad ajustado  $\mathbf{v}$  se define como el campo que minimiza  $J(\mathbf{v})$  sujeto a (6.2) y la condición a la frontera

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{U}^0 \cdot \mathbf{n} \text{ sobre toda la frontera } \Gamma. \quad (6.9)$$

Omitimos el subíndice  $d$  para distinguir a  $\mathbf{v}$  del campo  $\mathbf{v}_d$  obtenido con las condiciones de frontera Dirichlet (6.6). El campo está dado por

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}^0 + \mathbb{S}^{-1} \nabla \lambda \quad (6.10)$$

donde  $\lambda$  es solución de la ecuación

$$-\nabla \cdot \mathbb{S}^{-1} \nabla \lambda = \nabla \cdot \mathbf{v}^0 \text{ en } R. \quad (6.11)$$

sujeta a las condiciones de frontera puramente Neumann

$$\mathbf{n} \cdot \mathbb{S}^{-1} \nabla \lambda = \mathbf{n} \cdot (\mathbf{U}^0 - \mathbf{v}^0) \text{ sobre toda la frontera } \Gamma. \quad (6.12)$$

Un criterio para comparar la precisión con la cual  $\mathbf{v}_d$  y  $\mathbf{v}$  satisfacen la ecuación de continuidad (6.2) lo da el flujo de cada campo en una subregión  $R^*$  con frontera  $\Gamma^*$

$$\mathcal{F}(\Gamma^*, \mathbf{v}_d) = \oint_{\Gamma^*} \mathbf{v}_d \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma^* \quad (6.13)$$

Un criterio más completo lo da el cálculo de la masa que fluye en un tiempo  $t$  a través de la frontera  $\Gamma^*$  de  $R^*$  y comparar dicha masa con la masa  $M^*$  en  $R^*$ . De acuerdo con la ecuación de continuidad (6.2) la masa en  $R^*$  es constante y está dada por  $M^* = \rho V^*$  donde  $V^*$  es el volumen de  $R^*$ . La masa que transporta  $\mathbf{v}_d$  por la frontera  $\Gamma^*$  en un tiempo  $t$  es  $M_t^* = t \rho \mathcal{F}(\Gamma^*, \mathbf{v}_d)$ . El porcentaje de masa que fluye por la frontera  $\Gamma^*$  respecto a lo que idealmente es una masa constante  $M^*$ , es

$$\%M^* = 100 \frac{M_t^*}{M^*} = \frac{100t}{V^*} \mathcal{F}(\Gamma^*, \mathbf{v}_d) \quad (6.14)$$

Como ejemplo consideremos una región plana  $R$  con una base de  $31.2 \times 31.2 \text{ km}^2$  y una altura de  $4 \text{ km}$  y subregiones de la forma  $R^* = (a, b)^2 \times (c, d)$ . El campo inicial  $\mathbf{v}^0 = u^0 \mathbf{i} + v^0 \mathbf{j}$  tiene las componentes

$$u^0 = v^0 = \beta g(x) g(y) f(z), \quad (6.15)$$

con  $f = ze^{-z/H}$ ,  $H = 10 \text{ km}$ ,  $g = 1 - \cos \omega x$ ,  $\omega = \pi/2x_M$  y el parámetro  $\beta = 4.9 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$  se obtiene imponiendo a  $u^0$  y  $v^0$  un valor promedio en  $R$  de  $10 \text{ ms}^{-1}$ . El tiempo característico  $t$  está determinado por el tiempo que le

toma a una partícula de aire ir de  $x = 0$  a  $x = 31.2 \text{ km}$  con una velocidad media de  $10 \text{ ms}^{-1}$ . En nuestro caso tenemos  $t_c = \langle u^0 \rangle / x_M = 52 \text{ min}$ . Las problemas (6.5), (6.3), (6.6), y (6.11), (6.12) se resuelven con las funciones propias del operador  $L = \nabla \cdot \mathbb{S}^{-1} \nabla$  sujeto a las condiciones de frontera de cada caso y con la matriz identidad  $\mathbb{S} = I$ . La tabla siguiente da los valores calculados de  $\%M^*$ .

Tabla I. Valores de  $\%M^*$  para algunas regiones  $R^*$ , con  $t = 3 \text{ h}$  y el campo inicial  $\mathbf{v}^0$  con componentes (6.15) en la región  $R = (0, 31.2)^2 \times (0, 4) \text{ km}^3$ .

$R^* =$	$(13, 17)^2 \times (0, 2)$	$(10, 20)^2 \times (0, 3)$	$(5, 25)^2 \times (0, 4)$	$(0, 30)^2 \times (0, 4)$	$R$
$\mathbf{v}_d$	$6 \times 10^{-1}$	$2 \times 10^{-1}$	24	26	49
$\mathbf{v}$	$3 \times 10^{-2}$	$10^{-2}$	$4 \times 10^{-3}$	$8 \times 10^{-3}$	$10^{-15}$

Vemos que el uso de las condiciones de frontera Dirichlet (6.6) da valores irrealistas de  $\%M^*$  como 24% o 49%, mientras que la condición de frontera (6.9) da valores verdaderamente pequeños en toda la región de interés  $R$ . Como se explica en la referencia [22], las diferencias en los resultados se debe a que las condiciones de frontera Dirichlet (6.6) inducen discontinuidades en el campo  $\mathbf{v}_d$  que deterioran bastante la precisión con la cual dicho campo satisface la ecuación de continuidad (6.2).

### 7. Una limitación importante de algunos modelos de meso escala

Los flujos atmosféricos de meso escala se definen como movimientos atmosféricos con una escala que va de uno a varios cientos de kilómetros. El sistema de referencia usado por la mayoría de los textos y modelos de meso escala es un sistema cartesiano  $xyz$  tangente a la Tierra, con su origen en un punto sobre un modelo esférico terrestre con longitud  $\lambda_c$  y latitud  $\phi_c$ , el eje  $z$  perpendicular a la Tierra y los ejes  $x, y$ , tangentes al paralelo y al meridiano que pasan por el punto  $(\lambda_c, \phi_c)$ . En este sistema de referencia la aceleración gravitacional  $\mathbf{g}$  se aproxima por

$$\mathbf{g}^0 = -g \mathbf{k} \quad (7.1)$$

con  $g = 9.8 \text{ ms}^{-2}$ , lo que da la ecuación de movimiento usada en casi toda la literatura de flujos atmosféricos de meso escala [31-41], a saber,

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p - 2\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{v} - g\mathbf{k} + \mathbf{f}. \quad (7.2)$$

En esta sección veremos por medio de un ejemplo que esta ecuación tiene un rango de validez espacial y temporal muy limitado comparado con los resultados de la aceleración  $\mathbf{g}$  de un modelo esférico terrestre.

En meteorología la presión  $p$  y la densidad  $\rho$  se descomponen en la forma

$$p = p_0 + \mu p_1, \quad \rho = \rho_0 + \mu \rho_1, \quad (7.3)$$

donde  $\rho_0$  y  $p_0$  definen un estado de referencia termodinámico conocido que satisface la ecuación hidrostática

$$-\rho_0^{-1} \nabla p_0 + \mathbf{g} = \mathbf{0}. \quad (7.4)$$

La temperatura de referencia  $T_0$  se obtiene con la ecuación de estado  $p_0 = RT_0 \rho_0$ . La descomposición (7.3) introduce nuevas incógnitas  $p_1$ ,  $\rho_1$ , con las cuales la ecuación de movimiento (4.1) toma la forma

$$\mathbf{a} = -2\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{v} + \mathbf{F} \quad (7.5)$$

con  $\mathbf{F} \equiv \mu \rho^{-1} [\rho_1 \mathbf{g} - \nabla p_1] + \mathbf{f}$ . Ahora consideremos la ecuación de movimiento (4.1) con una aceleración aproximada  $\mathbf{g}^a$

$$\mathbf{a}^a = -\rho_a^{-1} \nabla p_a - 2\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{v}^a + \mathbf{g}^a + \mathbf{f}. \quad (7.6)$$

donde  $p_a$  y  $\rho_a$  están dados por

$$p_a = p_0 + \mu p_{1a}, \quad \rho_a = \rho_0 + \mu \rho_{1a}, \quad (7.7)$$

Usando los valores de referencia  $p_0$ ,  $\rho_0$ , determinados por (7.4) con la aceleración  $\mathbf{g}$  de un modelo esférico, la ecuación de movimiento (7.6) toma la forma siguiente con  $\mathbf{F}_a \equiv \mu \rho_a^{-1} [\rho_{1a} \mathbf{g} - \nabla p_{1a}] + \mathbf{f}$ ,

$$\mathbf{a}^a = -2\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{v}^a + \mathbf{g}^a - \mathbf{g} + \mathbf{F}_a \quad (7.8)$$

Para analizar la validez de  $\mathbf{g}^0$  consideramos la aceleración gravitacional de un modelo esférico terrestre con masa uniformemente distribuida

$$\mathbf{g} = -g \frac{r_e^2}{r^2} \mathbf{e}_r, \quad (7.9)$$

y su aproximación inmediata

$$\mathbf{g}^s = -g \mathbf{e}_r = -g(x\mathbf{i} + y\mathbf{j})/r - g(z + r_e)/r \mathbf{k},$$

donde  $\mathbf{e}_r$  es el vector unitario que va del centro de masa terrestre a una partícula de la atmósfera,  $r_e = 6378$  km es el radio promedio terrestre,  $r = [x^2 + y^2 + (z + r_e)^2]^{1/2}$ . Reemplazando  $1/r$  por  $1/r_e$  en  $\mathbf{g}^s$  obtenemos la aproximación

$$\mathbf{g}^{s1} = \mathbf{g}_h^s - g \frac{z + r_e}{r_e} \mathbf{k},$$

donde  $\mathbf{g}_h^s \equiv -g(x\mathbf{i} + y\mathbf{j})/r_e$  es la proyección de  $\mathbf{g}^s$  en el plano tangente  $xy$ . Despreciando  $z$  respecto a  $r_e$  y linealizando  $\mathbf{g}$  (7.9), obtenemos las aproximaciones

$$\begin{aligned} \mathbf{g}^{s2} &= \mathbf{g}_h^s - g \mathbf{k} \\ \mathbf{g}^1 &= \mathbf{g}_h^s - g(1 - 2z/r_e) \mathbf{k}. \end{aligned}$$

Las ecuaciones de movimiento (7.5), (7.8), y las ecuaciones de las velocidades

$$\frac{dx}{dt} = u, \quad \frac{dy}{dt} = v, \quad \frac{dz}{dt} = w,$$

definen un sistema cerrado de ecuaciones diferenciales de primer orden que resolvimos numéricamente con el método de Runge-Kutta de cuarto orden, para una partícula atmosférica localizada inicialmente en el origen  $x = y = z = 0$  con velocidad  $\mathbf{v} = 10\mathbf{i} \text{ ms}^{-1}$ , y  $\mu = 0$ ,  $\mathbf{f} = \mathbf{0}$ . Los resultados obtenidos con  $\mathbf{g}$  y  $\mathbf{g}^s$  son idénticos, lo que no ocurre con sus aproximaciones  $\mathbf{g}^0$ ,  $\mathbf{g}^{s1}$ ,  $\mathbf{g}^{s2}$ ,  $\mathbf{g}^1$ , como se ve en la Figura 2, la cual muestra que  $\mathbf{g}^0$  da una trayectoria razonable sólo muy cerca del origen.

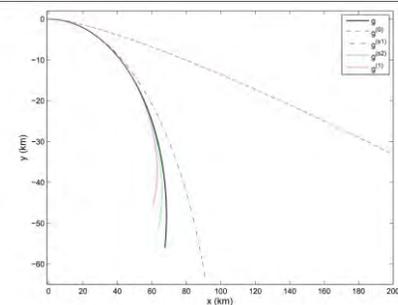


Figure 2: Trayectorias que proyecta sobre un plano tangente a un modelo esférico terrestre en un punto  $(\lambda_c = 0, \phi_c = 45^\circ) = (x = 0, y = 0, z = 0)$ , el movimiento de una partícula atmosférica localizada inicialmente en dicho punto con una velocidad  $\mathbf{v} = 10\mathbf{i} \text{ ms}^{-1}$ . Las trayectorias se calcularon con la aceleración gravitacional  $\mathbf{g}$  del modelo esférico terrestre y sus diferentes aproximaciones  $\mathbf{g}^0$ ,  $\mathbf{g}^{s1}$ ,  $\mathbf{g}^{s2}$ ,  $\mathbf{g}^1$ , como se indica en el texto.

El error en las trayectorias dadas por las aproximaciones  $\mathbf{g}^a$  puede medirse con la distancia entre la proyección de dichas trayectorias sobre la esfera terrestre y la proyección de la trayectoria dada por  $\mathbf{g}$ . Esta distancia está dada por

$$d^{(a)}(t) = r_e \mathbf{e}_r(\lambda_a, \phi_a) \cdot \mathbf{e}_r(\lambda, \phi),$$

donde  $(\lambda_a, \phi_a)$  y  $(\lambda, \phi)$  son las coordenadas esféricas en un instante  $t$  calculadas con  $\mathbf{g}^a$  y  $\mathbf{g}$ , respectivamente. La Figura 3 muestra que el error  $d^{(0)}$  de  $\mathbf{g}^0$  se incrementa rápidamente en comparación con los errores  $d^{(s1)}$ ,  $d^{(s2)}$ ,  $d^{(1)}$ , de las trayectorias dadas por  $\mathbf{g}^{s1}$ ,  $\mathbf{g}^{s2}$ ,  $\mathbf{g}^1$ . La escala vertical de la Figura 3 es logarítmica por la rapidez con que  $d^{(0)}$  crece. El intervalo de tiempo en cual es válido usar una aproximación  $\mathbf{g}^a$  puede estimarse fijando una cota del error  $d^{(a)}$ . Una cota razonable es la resolución horizontal de las mallas computacionales con las cuales se resuelven las ecuaciones de flujos de meso escala. De acuerdo con Pilke [32] la resolución horizontal puede ir de 100 m a 10 km. Consideremos una resolución intermedia de 1 km:  $d^{(a)} \leq 1$ . De acuerdo con esta cota, la Figura 3 indica que la integración de las ecuaciones de movimiento con  $\mathbf{g}^0$ ,  $\mathbf{g}^{s1}$ ,  $\mathbf{g}^1$ ,  $\mathbf{g}^{s2}$ , es confiable en un tiempo menor a  $t_{\max}^{(a)} \leq 15$  min, 1.25, 1.75, 2.15 h, respectivamente.

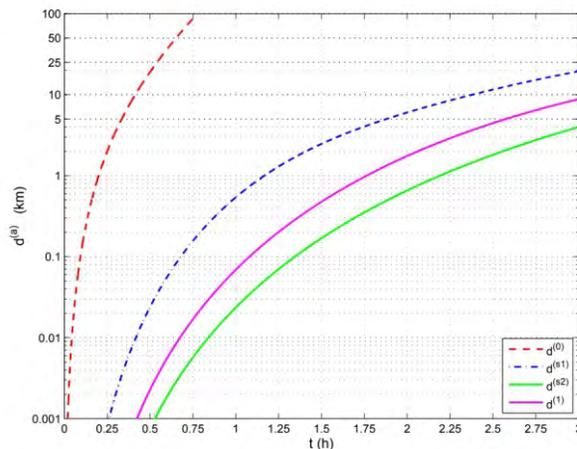


Figure 3: Comportamiento en el tiempo de la distancia sobre el modelo esférico terrestre entre la trayectoria calculada con  $\mathbf{g}$  y las trayectorias de las aproximaciones  $\mathbf{g}^0$ ,  $\mathbf{g}^{s1}$ ,  $\mathbf{g}^{s2}$ ,  $\mathbf{g}^1$ .

La aproximación más usada  $\mathbf{g}^0$  destaca por ser válida en un tiempo de integración tan pequeño.

Algunos modelos computacionales de meso escala tratan de incorporar los efectos de la curvatura terrestre por medio de proyecciones.

Un análisis de las limitaciones e inconsistencias de estos modelos y otros que usan coordenadas que siguen al terreno, se reporta en las referencias [38]–[41].

## 8. Conclusiones

Las necesidades nacionales de contar con recursos humanos debidamente preparados en ciencias atmosféricas, son enormes. Esto ofrece oportunidades laborales para quienes decidan dedicarse a estas disciplinas.

En el ámbito académico, los problemas que plantean las ciencias atmosféricas son enormes y sólo se irán comprendiendo poco a poco con la dedicación de las generaciones presentes y futuras. La enorme variedad procesos atmosféricos ofrece a quienes se decidan estudiar estas disciplinas, la oportunidad de aplicar sus conocimientos en otras áreas como las ingenierías, las ciencias básicas, biológicas y sus relaciones con las humanidades.

## References

- [1] Intergovernmental Panel on Climate Change 1996: IPCC Second Assessment Report: Climate Change 1995, Edited by J. T. Houghton et al. and published by Cambridge University Press; see in particular The Climate System: An Overview by K. E. Trenberth, J. T. Houghton, L. G. Meira Filho; 50-64 pp
- [2] La Jornada, viernes 17 de enero de 2014.
- [3] PROYECTO DE MODERNIZACIÓN DEL SERVICIO METEOROLÓGICO NACIONAL DE MÉXICO: Diagnóstico Institucional y Propuesta de Plan Estratégico 2010-2019.
- [4] Minuta de la reunión que tuvo lugar con el Coordinador del SMN el 1 de Julio de 2104, en las instalaciones del SMN.

- [5] WMO-No. 258, 2001: Guidelines for the Education and Training of Meteorological Personnel, 4th edition, 123 pp.
- [6] Dutton J. A., *The Ceaseless Wind: An introduction to the theory of atmospheric motion*, (McGrawHill, New York, 1976)
- [7] Holton J. R., *An introduction to dynamic meteorology*, 3rd. ed. (Academic Press, San Diego, 1992).
- [8] Haltiner G. J., Williams R. T., *Numerical Weather Prediction and Dynamic Meteorology* (Wiley and Sons, New York, 1980), 2nd ed.
- [9] Zeytounian R., *Asymptotic Modeling of Atmospheric Flows* (Springer, Berlin, 1990).
- [10] Kalnay E., *Atmospheric Modeling, Data Assimilation and Predictability*, (Cambridge University Press, New York, 2003).
- [11] Daley R., *Atmospheric data analysis* (Cambridge University Press, New York, 1991).
- [12] Lorenz E. N. 1963, The predictability of hydrodynamic flows, *Trans. NY Acad, Sci Series II* 25, 409-432.
- [13] Lorenz E. N., 1993: *The essence of chaos*. University of Washington Press, Seattle.
- [14] Monin A. S., Piterbarg L. I., *Forecasting weather and climate, in Limits of predictability*, Y. Kravtsov ed., (Springer, Berlin, 1993).
- [15] Seinfeld J. H., Pandis S. N. (2012). *Atmospheric chemistry and physics: from air pollution to climate change*. John Wiley & Sons.
- [16] Seaman N. L., "Meteorological modeling for air-quality assessments", *Atmos. Environ.* 34, 2231–2259 (2000).
- [17] Enting I. G., *Inverse problems in atmospheric constituent transport*, (Cambridge University Press, New York, 2002)
- [18] Kitada T. 1987. Effect of non-zero divergence wind fields on atmospheric transport calculations *Atmos. Environ.* 21 785-788.
- [19] Carmichael G. R., Peters L. K., Kitada T. 1986, A second generation model for regional-scale transport/Chemistry/deposition *Atmos. Environ.* 20 173. Kitada T, Carmichael G R, Peters L, *J. Clim. Appl. Met.* 23 1153.
- [20] Stohl A. 1998. Computation, accuracy and applications of trajectories-A review and bibliography. *Atmos. Environ.* 32 947-966.
- [21] Núñez M. A., Mendoza R. 2014, Structural instability of atmospheric flows under perturbations of the mass balance and effect in transport calculations, *aceptado para su publicación*.
- [22] Núñez M. A. 2102, Improving variational mass-consistent models of hydrodynamic flows via boundary conditions *Eur. Phys. J. Plus* 127 40.
- [23] Núñez M. A., Sanchez-Sanchez J. E. 2102, A formulation to compute mass-consistent models of hydrodynamic flows *Eur. Phys. J. Plus* 127 39.
- [24] Wunsch C., *The ocean circulation inverse problem* (Cambridge University Press, New York, 1996).
- [25] Raffel M., C. E. Willert, J. Kompenhans, *Particle Image Velocimetry: A Practical Guide* (Springer, Berlin, 1998).
- [26] Busch J., D. Giese, L. Wissmann, and S. Kozerke, "Construction of divergence-free velocity fields from cine 3D phase-contrast flow measurements.," *Magn. Reson. Med.*, vol. 000, pp. 1–11, Mar. 2012.
- [27] Sasaki Y., "An objective analysis based on the variational method" *J. Met. Soc. Japan* 36, 77–88 (1958); "Some basic formalisms in numerical variational analysis" *Mont. Wea. Rev.* 98, 875-883 (1970).

- [28] Ratto C. F., Festa R., Romeo C., Frumento O. A., Galluzzi 1994, Mass-consistent models for wind fields over complex terrain: The state of the art. *Environ. Software* 9 247-268.
- [29] Wang Y., C. Williamson, D. Garvey, S. Chang, J. Cogan, "Application of a Multigrid Method to a Mass-Consistent Diagnostic Wind Model", *J. Appl. Meteo.* 44, 1078 (2005).
- [30] Sanín N., Montero G. , "A finite difference model for air pollution simulation", *Adv. in Engineering Software* 38, 358–365 (2007).
- [31] Pielke R. A., *Mesoscale Meteorological Modeling* (Academic Press, New York, 1984).
- [32] Pielke R. A., *Mesoscale Meteorological Modeling* (Academic Press, New York, 2002).
- [33] Gutman L. N., *Introduction to the Nonlinear Theory of Mesoscale Meteorological Processes*, (Jerusalem, Israel Program, 1972). Yih C.-S., *Stratified Flows* (Academic Press, New York, 1980). Atkinson B. W., *Meso-scale Atmospheric Circulations* (Academic, London, 1981). Baines P. G., *Topographic Effects in Stratified Flows*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).
- [34] Perkey D. J. , *Formulation of Mesoscale Numerical Models*, in *Mesoscale Meteorology and Forecasting*, edited by P. S. Ray (American Meteorological Society, Boston, 1986).
- [35] Atkinson B.W., *Introduction to the fluid mechanics of meso-scale flow fields*, in *Diffusion and Transport of Pollutants in Atmospheric Mesoscale Flow Fields*, edited by A. Gyr and F.-S. Rys (Kluwer, Netherlands, 1995),.
- [36] Eppel D. P. , U. Callies, *Boundary Conditions and Treatment of Topography in Limited-Area Models*, in *Diffusion and Transport of Pollutants in Atmospheric Mesoscale Flow Fields*, edited by A. Gyr and F.-S. Rys (Kluwer, Netherlands, 1995), p. 24. Durran D. R. , *Numerical Methods for Wave Equations in Geophysical Fluid Dynamics*, (Springer, New York, 1998), p. 16.
- [37] Jacobson M. Z., *Fundamentals of atmospheric modeling*, (Cambridge University Press, U.S.A, 1999), pp. 100, 74-75.
- [38] Núñez M. A., *Análisis de la consistencia dinámica de algunos modelos meteorológicos en coordenadas generalizadas*, XX Congreso Mexicano de Meteorología y V Congreso Internacional de Meteorología, Acapulco, Guerrero, México (2011).
- [39] Núñez M. A., *Analysis of some atmospheric mesoscale models*, *Revista Mexicana de Física*, Vol. 51, pp. 217-229 (2005).
- [40] Núñez M. A., *Domain of validity of some atmospheric mesoscale models*, *Il Nuovo Cimento C*, Vol. 26, pp. 469-491 (2003).
- [41] Núñez M. A., *Map projections and topography in atmospheric mesoscale modeling*, *Il Nuovo Cimento C*, Vol. 25, pp. 13-34 (2002).

A photograph of two surgeons in an operating room. They are wearing surgical masks and caps, and are focused on a patient. The room is illuminated by large, bright surgical lights. The background shows a 'TIME OUT' board and a window with a grid pattern.

# **La física detrás de una imagen médica obtenida por Resonancia Magnética**

**S. S Hidalgo-Tobón<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>**Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa**

<sup>2</sup>**Departamento de Imagenología, Resonancia Magnética Nuclear, Hospital  
Infantil de México Federico Gómez**

## Resumen

En esta contribución se describe la historia de la imagenología por resonancia magnética nuclear. Los principios físicos de la Resonancia Magnética están descritos en una manera básica, y finalmente se presentan proyectos de investigación de frontera en esta campo.

## 1.- Introducción

La imagenología por Resonancia Magnética Nuclear (RMN) es una técnica que ha revolucionado la imagen en el ámbito médico. Esta técnica ha permitido avanzar en el ámbito científico en distintas disciplinas, por ejemplo, utilizando esta técnica es posible ver flujo del corazón, marcadores hechos de nano-partículas de óxido de hierro, un bebé en útero en alta resolución, incluso observar una sola célula. El desarrollo de esta técnica ha sido el resultado de la contribución de varios científicos de distintas formaciones. De años recientes, se encuentran distintos científicos que han obtenido un premio Nobel en 5 ocasiones distintas por su contribución al desarrollo de la Resonancia Magnética Nuclear.



Figura1. Sistema de 1.5 Tesla para la obtención de imágenes por Resonancia Magnética

Uno de los principales contribuidores a esta técnica se remonta al Siglo XVII, el matemático e ingeniero Jean Baptiste Joseph Fourier(1768-1830), el cual desarrolló la transformada de Fourier, sin la cual sería imposible crear imágenes por RMN. El método que propuso, permite procesar de manera rápida la fase y la frecuencia de la señal proveniente de datos de RMN, para después transformarlos a una imagen. El primero en utilizar la transformada de Fourier fue Richard Ernst en 1975 para la obtención de una imagen por RMN [1-10].

Nikola Tesla (1856-1943), fue otro científico que descubrió el campo magnético rotante, el cual es la base para cualquier maquinaria de corriente alterna. La unidad de campo magnético es en honor a todo el trabajo realizado en electromagnetismo. (1 Tesla = 1 Newton/Ampere-metro). El campo magnético de la tierra es aproximadamente de  $10^{-4}$  Tesla.

Sir Joseph Larmor (1857-1942) fue el primero en calcular la razón a la cual la energía es irradiada por un electrón acelerado. Establece la ecuación de Larmor, que nos permite saber a que frecuencia precesa el núcleo del átomo debido a la presencia de un campo magnético. Esta ecuación permite saber la frecuencia a la cual el núcleo absorberá energía. En el caso de la Imagenología por Resonancia Magnética (IRM), se centra en núcleos de átomos de hidrógeno, que dependiendo la intensidad del campo magnético podría variar entre 50 a 130 MHz, esto, en ámbitos clínicos.

## La Historia

Las raíces de la RMN fueron establecidas por Walter Gerlach (1888-1979) y Otto Stern (1888-1969), quienes publicaron un experimento donde demostraron la naturaleza cuántica del momento magnético de átomos de plata. Isidor Rabi (1898-1988), quien estudió las propiedades magnéticas de cristales, creando un aparato que producía oscilaciones electromagnéticas a la misma frecuencia que la precesión de Larmor en un sistema atómico dentro de un campo magnético. Rabi recibió el premio Nobel de Física en 1944.

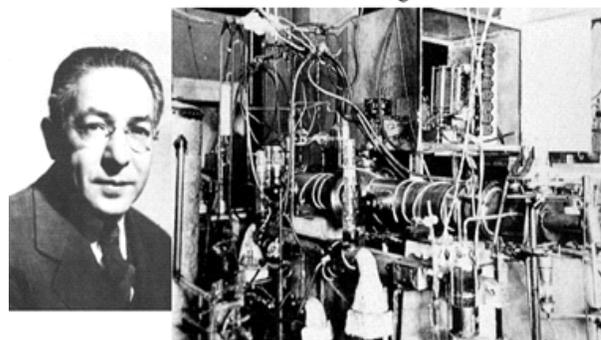


Figura 2 Rabi II recibió el premio Nobel de Física en 1944

Félix Bloch y Edward Purcell describieron por separado el fenómeno físico de la resonancia magnética a partir de las propiedades magnéticas de ciertos núcleos en presencia de un campo magnético.

Ellos midieron la señal de precesión de los espines nucleares en muestras de agua y parafina bajo la presencia de un campo magnético. Bloch y Purcell recibieron el premio Nobel de Física en 1952.

Erwin Hahn desarrolló un método para estudiar la difusión molecular en líquidos a partir de una secuencia Espín-Eco, así como la forma de excitar estos núcleos a partir de pulsos de radiofrecuencia.

El desarrollo de la NMR a partir de los 50's fue en muestras tanto biológicas como no biológicas, también llevó al estudio de tiempos de relajación. Raymond Damadian en 1971 midió estos tiempos en ratas, tanto en tejido sano como en tumores cancerígenos, encontrando que los tiempos eran más largos en los tejidos enfermos.

Hasta este momento todo había sido en imágenes unidimensionales. En 1974, Paul Lauterbur y Peter Mansfield, de forma independiente, describieron el uso de gradientes de campo magnético para la localización espacial de la señal de RMN. Este hecho fue el precedente para la Imagenología por Resonancia Magnética (IRM). Por sus contribuciones Lauterbur y Mansfield recibieron el premio Nobel de Fisiología o Medicina en el 2003. Las publicaciones, de Mansfield y Lauterbur en 1973, presentaban ideas muy simples, proponían que si se podía variar espacialmente el campo magnético a lo largo de un objeto, las frecuencias de precesión deberían variar espacialmente. Este fue el punto clave que abrió la puerta a la imagenología por resonancia magnética [10-20].

En 1975, Richard Ernst, describió el uso de la transformada de Fourier, que permite codificar fases y frecuencias para reconstruir imágenes en 2D. Esta técnica sigue siendo utilizada en IRM. Richard Ernst propuso cambiar la dirección de campos magnéticos en el dominio del tiempo. Esto permitió reconstruir una imagen rápidamente a partir de datos provenientes de señales de RMN. Richard Ernst recibió el premio Nobel en Química en 1991 por su contribución de la Transformada de Fourier Pulsada.

En 1975, Peter Mansfield propone el uso de la técnica de línea, lo que permitiría que en 1977 se obtuviera la primera imagen en vivo, de la sección transversal de un dedo humano. En 1977, Hinshaw et al. obtiene una imagen de la muñeca de una mano, y Damadian, obtiene una imagen de una sección

transversal del tórax. En 1980, Edelstein *et al.*, utilizó la técnica de Ernst para obtener una imagen en 5 minutos. En 1986, se empieza a obtener una imagen en 5 segundos aproximadamente.

A partir de los 80's se desencadena un desarrollo tecnológico, que ha permitido obtener imágenes en cuestión de milisegundos, con el desarrollo de distintas secuencias de pulsos, diferente a la propuesta por Erwin Hahn. En 1982, Peter Mansfield reporta en tiempo real, imágenes del corazón, utilizando una técnica llamada EPI (Ecoplanar Imaging). Esto permitió mejorar la resolución temporal en las imágenes, lo que en el ámbito clínico, permitió la obtención de imágenes en lo que se conoce como la resonancia magnética funcional (BOLD, Blood Oxygen Level Dependent).

### La física detrás de la Imagen

La resonancia magnética está basada en la interacción entre un campo magnético externo aplicado y un núcleo que posee un "espín" (momento angular intrínseco). El espín nuclear o para ser más precisos, el momento angular del espín nuclear, es una de las propiedades del átomo y su valor depende de la composición precisa del átomo. Los detalles precisos varían de un núcleo a otro.

Si se recuerda, el átomo está formado por tres partículas fundamentales: protones, neutrones y electrones. Los protones (carga positiva) y neutrones (carga neutra) se encuentran en el núcleo, mientras que los electrones (carga negativa) se encuentran en capas u orbitales, rodeando el núcleo. Todos los átomos de un mismo elemento tienen el mismo número atómico (número de protones). Y finalmente otra propiedad a considerar es el espín. Se puede considerar que el núcleo rota constantemente sobre su eje a una velocidad constante. Este eje de rotación es perpendicular a la dirección de la rotación Figura 1.

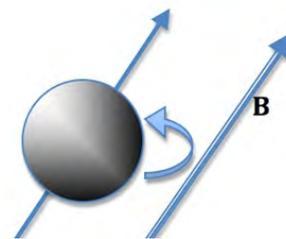


Figura 3 Núcleo del átomo de Hidrógeno precesando bajo la presencia de un campo magnético **B**.

Ahora bien, se encuentra un número muy limitado de valores asignados al espín I, el cual está cuantizado a ciertos valores discretos. Estos valores depende del número atómico, y peso atómico del núcleo que se este estudiando. Para los fines de la imagenología por resonancia magnética, se utilizan los núcleos cuyo espín tenga un valor asociado a  $1/2$ ,  $3/2$ ,  $5/2$ , etc.. El hidrógeno, es un átomo, que solo tiene un protón en el núcleo, tiene un espín igual a  $1/2$ , y es el elemento más abundante en el cuerpo humano. El hidrógeno se encuentra en las moléculas de los tejidos orgánicos como sería el caso de la materia blanca, materia gris en el cerebro, riñones, hígado, grasa, corazón, músculos, etc.

El fenómeno de la Resonancia magnética se puede describir con matemática rigurosa de un núcleo con espín y sus interacciones con campos magnéticos. También la RM se puede describir usando los conceptos de la mecánica clásica. Adicionalmente al espín, un núcleo cargado positivamente, se puede visualizar para fines pedagógicos como un pequeño imán, puesto que tiene un campo magnético local o momento magnético.

Si se plantea la siguientes situación, donde se tiene un volumen de un tejido biológico, el cual va a contener una gran cantidad de átomos de hidrógeno; si se observa con detalle no se tendrá una magnetización neta, sin embargo, si colocamos la muestra bajo la presencia de un campo magnético, se observa que cada núcleo empezará a precesar a lo largo de la dirección del campo magnético. La similitud se tiene con el movimiento del trompo, si se observa con detalle, el trompo gira sobre su propio eje, pero a su vez, también esta girando alrededor de otro eje, la gravedad terrestre (Figura 4).

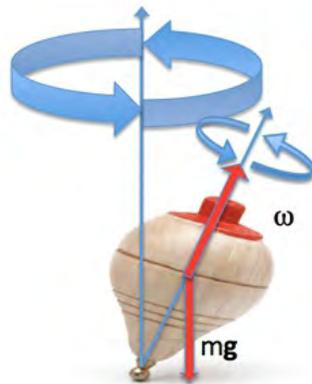


Figura 4. El trompo presenta dos movimientos, uno sobre su propio eje y otro debido al campo gravitacional.

Ahora regresando a los núcleos de hidrógeno bajo la presencia de un campo magnético, se observa esta doble rotación, sin embargo, el movimiento de precesión debido al campo magnético, se puede describir a partir de la Ecuación de Larmor, la cual nos indica con que frecuencia esta girando. La frecuencia de Larmor, depende de la intensidad de campo magnético y de la constante giromagnética (esta constante es como la huella digital para distintos elementos de la tabla periódica). El núcleo de hidrógeno, para un sistema de 1.5 Tesla (unidad de campo magnético), precesa a una frecuencia de 63.86 MHz (MegaHertz).

Una vez dentro del campo magnético, los espines nucleares se alinearán en dirección del campo magnético, unos en dirección del campo, de forma paralela, y otros de forma antiparalela, esto dependerá de la temperatura del tejido, la energía asociada al campo magnético. Ya alineados, se enviarán pulsos de Radio-Frecuencia (RF), durante el pulso, el núcleo absorberá la porción de energía a una frecuencia particular; posteriormente se elimina el pulso de RF, por lo que el núcleo liberará energía, se inducirá una señal que varíe con el tiempo.

Hasta este momento, todos los núcleos precesan a una determinada frecuencia, dependiendo la intensidad de campo magnético, y se tiene la siguiente pregunta, ¿ cómo poder diferenciar, por ejemplo, la señal que proviene de los núcleos de hidrógeno del ojo derecho, con respecto a la señal que proviene del ojo izquierdo ?. Y es aquí donde la contribución de Mansfield y Lauterbur, es vital, al agregar una variación lineal de campo magnético en los tres ejes, x, y y z, la frecuencia de Larmor también varía. De esta manera se puede codificar la señal que nos permitirá la formación de la imagen. El objetivo de la imagenología es correlacionar las señales medidas provenientes de ciertas posiciones espaciales, de donde se originan las señales.

Como se ha descrito previamente, los núcleos precesan a diferentes frecuencias, dependiendo la posición, el campo magnético aplicado cambia. Por lo que se origina una señal de resonancia magnética, bien definida, esta señal es una superposición de señales, que provienen de la región de la muestra excitada.

El ente matemático que permite transformar ésta

señal, a una posición espacialmente hablando, se conoce como transformada de Fourier, pasando de un dominio de frecuencias a un dominio de posiciones. La codificación de la señal a lo largo de los 3 ejes,  $x$ ,  $y$ , y  $z$ , se realiza a partir de la Transformada de Fourier. El ejemplo más simple se tiene, en la obtención de una imagen anatómica en cortes axiales ( a lo largo del eje del cuerpo ), por lo que el primer paso es, la selección de corte, por lo que se realiza la codificación del selector de corte (eje  $z$ ), segundo, la codificación de frecuencia (eje  $x$ ), y el tercero, la codificación de fase (eje  $y$ ). Estas codificaciones, son cambios del dominio de frecuencias y fases a dominios de posición (coordenadas espaciales  $x, y$  y  $z$ ).

La instrumentación básica para obtener una imagen por resonancia magnética es, un imán que permita alinear los espines nucleares. Una antena de RF que emita pulsos de RF y otra antena de RF, en donde se induce una señal proveniente de los núcleos. Tres bobinas gradientes en  $x, y$  y  $z$ , que permiten codificar la señal tridimensionalmente.

Una electrónica asociada como amplificadores, pre-amplificadores para el sistema de RF y bobinas gradientes, y una jaula de Faraday (asegura que no entre ni salga RF del cuarto, donde está colocado el imán).

### Estado del Arte en Resonancia Magnética

La imagenología por RM es una técnica no invasiva, se usa radiación no ionizante, lo que le da ventaja sobre técnicas como rayos-X, tomografía computacional, y medicina nuclear. En los últimos 20 años, se han desarrollado técnicas que permiten un mejor diagnóstico en la patologías [21-25]. La resonancia magnética funcional, la cual utiliza la sangre misma como un medio de contraste endógeno, permite de una manera indirecta, conocer la región "activada", a partir de un estímulo determinado (Figura 5).



Figura 5. Imágenes por Resonancia magnética, se muestran los tractos que son producto de la difusión de los núcleos de hidrógeno contenidos en la materia blanca. Se muestra la diferencia entre pacientes pediátricos con déficit de atención y niños sanos.

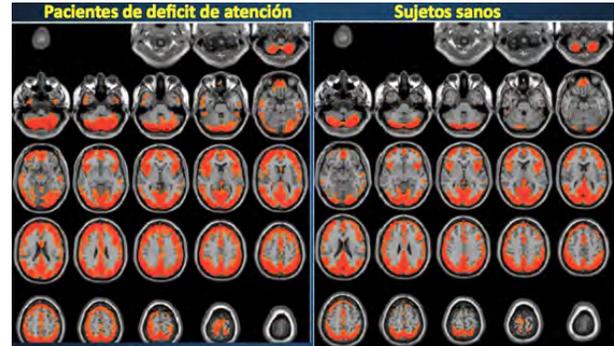


Figura 6. Imágenes por Resonancia magnética, se muestran las zonas que se activan. Esta técnica está basada en la susceptibilidad magnética, pues la sangre al perder los oxígenos, que acarrea, modifica el campo magnético en su entorno, por lo que cambia la frecuencia de precesión de los hidrógenos que se encuentran en los alrededores debido a la oxigenación. Se muestra la diferencia entre pacientes pediátricos con déficit de atención y niños sanos.

La imagen ponderada por difusión ha permitido la valoración y clasificación de tejidos cancerosos, la técnica de la difusión está basada en la difusión de las moléculas de agua, la difusión cambia, dependiendo la composición molecular del tejido. El tensor de difusión, es otra técnica, la cual permite reconstruir, a partir de la difusión de las moléculas del agua y de unos gradientes de campo magnético, "perseguir" el camino preferencial de dichas moléculas. El corazón ha sido uno de los órganos que ha requerido un desarrollo más extenso de la instrumentación de la IRM; por ahora, se obtienen imágenes de buena calidad, lo cual requirió una sincronización de la toma de imágenes con el movimiento del corazón.

La técnica de 4D-Flujo por IRM permite identificar patrones de flujo en pacientes con cardiopatías congénitas, difíciles de observar con otros métodos diagnósticos. La evaluación de patrones de flujo podría contribuir a comprender las consecuencias hemodinámicas de diferentes cardiopatías congénitas. La espectroscopía por RM, ha permitido desarrollarse in-vivo, sin utilizar un medio de contraste, lo cual ha sido útil en patologías en el cerebro.

Sin embargo, no todo se remonta al uso del núcleo del hidrógeno, se pueden utilizar otros núcleos como el Xenón, Carbono, Sodio, Fósforo, para obtener, un estudio funcional de los órganos. En el caso del Xenón, Fluor, se utilizan, en su estado hiperpolarizado, que es sensible a la IRM, el cual se le

hace respirar al paciente para obtener imágenes de los pulmones. Esta técnica ha permitido mejorar el diagnóstico en pacientes que sufren de cáncer en pulmones (Figura 7). La creación de nuevos medios de contraste que permitan la evaluación de la funcionalidad de distintos órganos, como sería el caso de las nano-partículas de óxido de hierro.

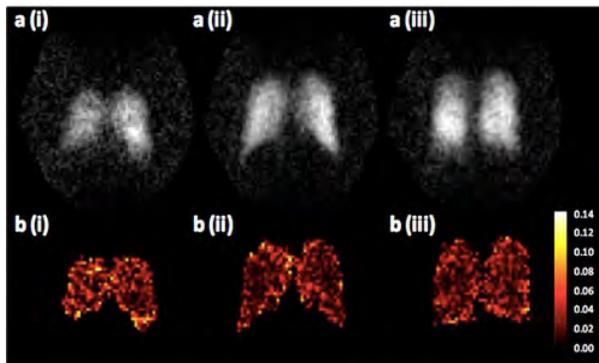


Figura 7. Imágenes por Resonancia magnética de pulmón usando como medio de contraste  $^{19}\text{F}$  a) voluntarios sanos b) mapas del cociente de anisotropía por difusión (ADC).

La IRM es una de las principales modalidades de imagen en el ambiente clínico. Los desarrollos tecnológicos en los últimos 15 años, han permitido estudiar la funcionalidad y anatomía del cuerpo humano. Aún queda optimizar el diseño de imanes superconductores, bobinas gradientes, antenas de Radio-Frecuencia, que permita obtener estudios en tiempos más cortos, con mejor resolución temporal y espacial, en todos los órganos del cuerpo humano [26-32]. Finalmente, la motivación de estos avances es entender el funcionamiento del cuerpo humano, así como en las patologías que lo aquejan.

## Referencias

1. Tubridy N, McKinstry CS. Neuroradiological history: Sir Joseph Larmor and the basis of MRI physics. *Neuroradiology* 2000;42:852-5.
2. Gerlach W, Stern O. Über die richtungsquantelung im magnetfeld. *Ann Phys* 1924;74:673.
3. Rabi I, Zacharias J, Millman S, Kusch P. A new method of measuring nuclear magnetic moments. *Phys Rev* 1938;53:318.
4. Gorter CJ, Broer L.J.F. Negative result of an attempt to observe nuclear magnetic resonance in solids. *Physics (The Hague)*. 1942;9:591.
5. Bloch F, Hanson W, Packard M. Nuclear infraction. *Phys Rev* 1946;69:127.
6. Purcell E, Torrey H, Pound R. Resonance absorption by nuclear magnetic moments in a solid. *Phys Rev* 1946;69:37-8.
7. Hahn EL. Spin echoes. *Phys Rev.* 1950;69:580-94.
8. Tanaka K, Yamada Y, Shimizu T, Sano F, Abe Z. Fundamental investigations (in vitro) for a non-invasive method of tumor detection by nuclear magnetic resonance. *Biotelemetry* 1974;1:337-50.
9. Damadian R, Minkoff L, Goldsmith M, Stanford M, Koutcher J. Field focusing nuclear magnetic resonance (FONAR): visualization of a tumor in a live animal. *Science* 1976;194:1430-2.
10. Tal Geva, Magnetic Resonance Imaging: Historical Perspective. *Journal of Cardiovascular Magnetic Resonance* (2006) 8, 573-580.
11. Damadian R, Minkoff L, Goldsmith M, Stanford M, Koutcher J. Tumor imaging in a live animal by focusing NMR (FONAR). *Physiol Chem Phys* 1976;8:61-5.
12. Singer R.J. Blood flow rates by NMR measurements. *Science* 1959;130:1652-3.
13. Lauterbur PC. Image formation by induced local interactions: examples of employing nuclear magnetic resonance. *Nature* 1973;242:190-1.
14. Mansfield P, Grannell PK. NMR 'diffraction' in solids? *J Phys C: Solid State Phys* 1973;6:L422-6.
15. Mansfield P, Grannell PK, Garroway AN, Stalker DC. Multi-pulse line narrowing experiments: NMR "diffraction" in solids? *Proceedings. First Specialized Colloque Ampe`re. Cracow, Poland* 1973:16-27.
16. Garroway AN, Grannell PK, Mansfield P. Image formation in NMR by a selective irradiative process.

- J Phys C: Solid State Phys 1974;7:L457-62.
17. Kumar A, Welti D, Ernst RR. NMR Fourier zeugmatography. *J Mag Res* 1975;18:69-83.
18. Hinshaw WS, Bottomley PA, Holland GN. Radiographic thin- section image of the human wrist by nuclear magnetic resonance. *Nature* 1977;270:722-3.
19. Damadian R, Goldsmith M, Minkoff L. NMR in cancer: XVI. FONAR image of the live human body. *Physiol Chem Phys* 1977;9:97-100.
20. Clow H, Young IR. Britain's brains produce first NMR scans. *New Scientist* 1978;80:588.
21. Edelstein WA, Hutchison JM, Johnson G, Redpath T. Spin warp NMR imaging and applications to human whole-body imaging. *Phys Med Biol* 1980;25:751-6.
22. Bailes DR, Young IR, Thomas DJ, Straughan K, Bydder GM, Steiner RE. NMR imaging of the brain using spin-echo sequences. *Clin Radiol* 1982;33:395-414.
23. Hidalgo Tobon S, Theory of Gradient Coil Design Methods for Magnetic Resonance Imaging, *Concepts in Magnetic Resonance Part A* 2010; 36A(4):223 - 242.
24. Haacke M, Brown R, Thompson M, *Magnetic Resonance Imaging*, Wiley & Sons, 1999. ISBN. 0-471-35128-8.
25. Hidalgo S, Dies P, Celis B, Barragan E. Diffusion Tensor Imaging of the Cerebellum-prefrontal Area in ADHD Children, *Proceedings Annual Meeting of the Radiological Society of North America*, December 2013.
26. De Celis B, Hidalgo Tobon S, Dies-Suarez P, Barragan E. A Multi-methodological MR resting State Network Analysis to Assess the changes in Brain Physiology of Children with ADHD, *Plos One*, 2014, 9(6):e99119.
27. Ball I, Couch M, Tao L, Fox M, 19F Apparent Diffusion Coefficient MRI of Inert Fluorinated Gases in Human Lungs. *Proc. Intl. Soc. Mag. Reson. Med.* 21 (2013) 1483.
28. Fogel MA, Wilson RD, Flake A, Johnson M, Cohen D, McNeal G, Tian ZY, Rychik J. Preliminary investigations into a new method of functional assessment of the fetal heart using a novel application of 'real-time' cardiac magnetic resonance imaging. *Fetal Diagn Ther* 2005;20:475-80.
29. Aguayo JB, Blackband SJ, Schoeniger J, Mattingly MA, Hintermann M. Nuclear magnetic resonance imaging of a single cell. *Nature* 1986;322:190-1.
30. Gozansky EK, Ezell EL, Budelmann BU, Quast MJ. Magnetic resonance histology: in situ single cell imaging of receptor cells in an invertebrate (*Lolliguncula brevis*, Cephalopoda) sense organ. *Magn Reson Imaging* 2003;21:1019-22.
31. Grattan-Guinness I, Fourier JBJ. Joseph Fourier, 1768-1830; a survey of his life and work, based on a critical edition of his monograph on the propagation of heat, presented to the Institut de France in 1807. Cambridge: MIT Press, 1972.
32. Roguin A. Nikola Tesla: the man behind the magnetic field unit. *J Magn Reson Imaging* 2004;19:369-74.

The background of the entire page is a photograph of a night sky. The upper portion is filled with a dense field of stars of various colors, including white, blue, and yellow. A prominent, horizontal band of glowing aurora borealis in shades of orange, yellow, and red stretches across the middle of the frame. Below the aurora, a dark mountain range is visible against the night sky. In the foreground, there are some faint lights and silhouettes of trees or structures, suggesting a mountainous landscape at night.

# **La crisis de la supersimetría: El ocaso de las teorías de cuerdas**

**Alfredo Macías**

**Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa**

Durante los últimos 100 años, nuestra concepción del Universo ha cambiado drásticamente tanto a escalas cosmológicas como subatómicas. A escalas grandes hemos transitado de un Universo Newtoniano de edad desconocida poblado únicamente por las estrellas en nuestra Vía Láctea a un Universo gobernado por la Relatividad General conteniendo cientos de billones de galaxias, además de las correspondientes estrellas contenidas en cada galaxia.



Image credit: Richard Payne

La edad de este Universo es de 13.8 billones de años desde la ocurrencia del Big Bang, cuya parte observable tiene un diámetro de alrededor de 92 años

luz, y está llena de materia normal o bariónica, materia oscura y energía oscura.

A escalas microscópicas, la revolución ha sido igual de dramática: Hemos transitado de un Universo compuesto de núcleos atómicos, electrones y fotones, gobernado por las interacciones gravitacional y electromagnética, a un entendimiento mucho más fundamental de las partículas elementales y de las interacciones que hacen posible la existencia del Universo, es decir, la interacción nuclear fuerte, la interacción nuclear débil además de las interacciones gravitacional y electromagnética.

Los núcleos están formados por protones y neutrones, los cuales a su vez están formados por quarks y gluones. Existen dos tipos de interacciones nucleares, la fuerte y la débil y tres generaciones de partículas, tanto de leptones (electrones, muones, tauones y sus correspondientes neutrinos), como de quarks, hadrones fundamentales, (u = arriba, d = abajo, c = encanto, s = extraño, t = cima, b = fondo). Adicionalmente tenemos bosones de norma, los cuales son característicos de las simetrías asociadas a las interacciones, en particular a las vectoriales como la interacción nuclear fuerte, la interacción nuclear débil y la interacción electromagnética. Todo lo anterior junto con el bosón de Higgs constituyen el llamado Modelo Estándar de las partículas elementales. Las fuentes de las interacciones son los fermiones, los bosones transportan y propagan las interacciones en el espacio-tiempo y es el bosón de Higgs el que provee de masa a todas las partículas.

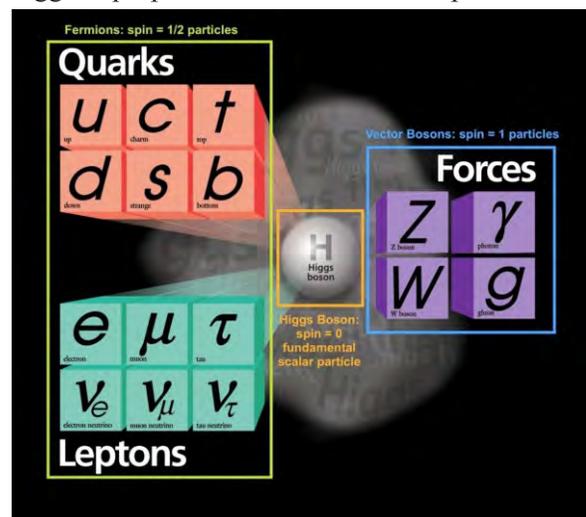


Image credit: Fermilab.

En principio, combinando el Modelo Estándar de las partículas elementales con el Modelo Estándar de la cosmología surgido de la Relatividad General, podríamos prácticamente explicar nuestro Universo físico real. Comenzando a partir de 10-10 segundos después del Big Bang, cuando el contenido del Universo era un poco más de materia que de antimateria. En principio, podríamos ahora explicar todos los fenómenos observados en nuestro Universo usando solamente las leyes de la física actualmente bien establecidas: Relatividad General y Mecánica Cuántica, entre otras.

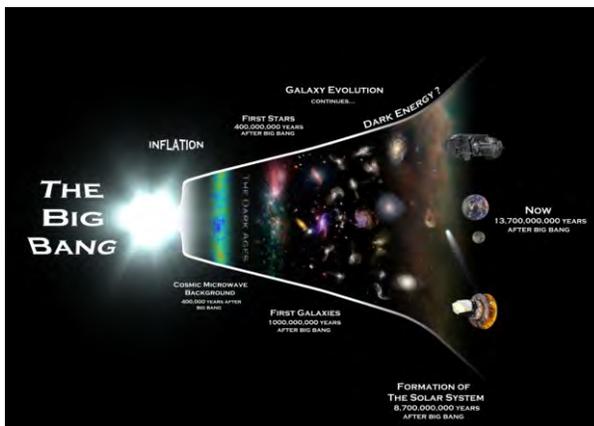


Image credit: Rhys Taylor, Cardiff University.

Podemos reproducir, mediante simulaciones, un Universo que es en todos los aspectos físicamente indistinguible del nuestro. Sin embargo, existen algunas preguntas fundamentales que actualmente todavía no podemos responder:

1. ¿Por qué existe más materia que antimateria?
- ¿De dónde proviene la asimetría?
2. ¿Cuál es la naturaleza de la energía oscura?
- ¿Qué tipo de campo/partícula es responsable de ella?
3. ¿Cuál es la naturaleza de la materia oscura?
- ¿Qué tipo de campo/partícula es responsable de ella?
4. Sabemos que a energías altas las interacciones débil y la electromagnética se unifican, y se manifiestan separadas cuando la simetría electrodébil se rompe a bajas energías. Eventualmente la fuerza fuerte también prácticamente podemos decir que casi se unifica con la electrodébil a energías todavía más altas. La pregunta es: ¿La interacción gravitatoria también se unificaría a energías aún mayores?
5. ¿Por qué las partículas elementales del Modelo Estándar tienen la masa que medimos? Este

problema se conoce como el problema de la jerarquía/estructura de la materia en Física.

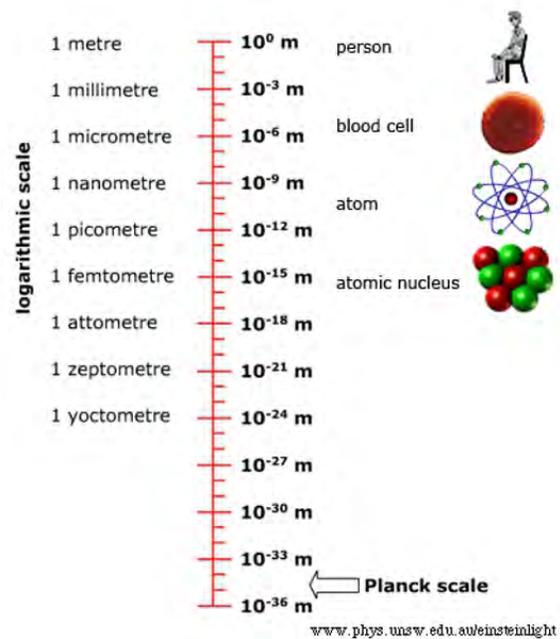


Image credit: © School of Physics UNSW.

Existen tres constantes fundamentales de la naturaleza: la constante de gravitación ( $G$ ), la constante de Planck ( $\hbar$ ), y la velocidad de la luz ( $c$ ). Podemos combinar estas constantes de diferentes maneras para generar unidades para el tiempo, la longitud y la masa, los cuales se conocen como las unidades de Planck: tiempo de Planck, longitud de Planck y masa de Planck.

Las masas de las partículas del Modelo Estándar son del orden de la masa de Planck, lo cual significa una energía de alrededor de  $10^{28}$  eV. Esto es una masa **17 órdenes de magnitud**, o un factor de 100,000,000,000,000,000 mayor que la partícula más pesada observada en el Universo. En particular el bosón de Higgs debe tener la masa de Planck y dado que se acopla con las otras partículas para dotarlas de masa, éstas adquieren *masas también del orden de la de Planck*.

Por tanto, ante la pregunta: ¿Por qué las partículas elementales tienen la masa que medimos y no otra masa mucho mayor? La mejor solución y la más elegante es proponer la existencia de una simetría extra, la cual cancela todas las contribuciones a nivel de la escala de Planck y preserva las masas de las

partículas durante el camino a energías mucho más bajas.

Esta es la idea básica detrás de la llamada supesimetría, conocida como SUSY, introducida en 1970 por Golfand and Likhtman en su modelo de electrodinámica cuántica y fueron Mikhail Shifman e independientemente Julius Wess quienes la formalizaron para teorías de Yang-Mills en 1974. La supersimetría es una simetría que mezcla bosones con fermiones, hace la predicción audaz de que debe de existir el mismo número de bosones que de fermiones en el Modelo Estándar de las partículas elementales, esto quiere decir, que cada partícula de éste (fermión y bosón} tiene un compañero supersimétrico, el cuál tiene propiedades casi idénticas excepto que tiene un espín que difiere por un valor de  $\pm\frac{1}{2}$  respecto a su contraparte en el Modelo Estándar.

Este compañero supersimétrico debería proteger la masa de todas las partículas, tanto las del Modelo Estándar y las de SUSY, todo el camino hasta la escala en donde la SUSY se rompe, en este punto los compañeros supersimétricos adquieren masas más pesadas que las masas normales. Si la SUSY se rompe, en la escala correcta para resolver el problema de la jerarquía, en algún lugar entre los 100 GeV y 1 TeV, entonces las partículas supersimétricas más ligeras deberían ser accesibles mediante el LHC (Large Hadron Collider) en el CERN de Ginebra en Suiza.

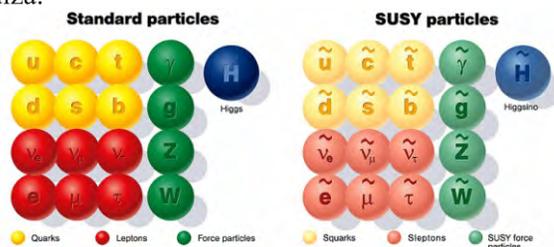


Image credit: DESY at Hamburg.

Adicionalmente, si consideramos todas las partículas del Modelo Estándar y estimamos la intensidad de las tres interacciones, las dos nucleares y la electromagnética, encontraremos que la intensidad de las interacciones, parametrizada por sus constantes de acoplamiento, cambia con la energía. Las intensidades casi se intersectan para una energía de alrededor  $10^{15}$  GeV. Si añadimos la supesimetría, la inclusión de las nuevas partículas

modifica la evolución de las constantes de acoplamiento. Si SUSY fuera correcta, podría indicarnos el lugar donde las interacciones nuclear fuerte, nuclear débil y electromagnética se unifican para muy altas energías.

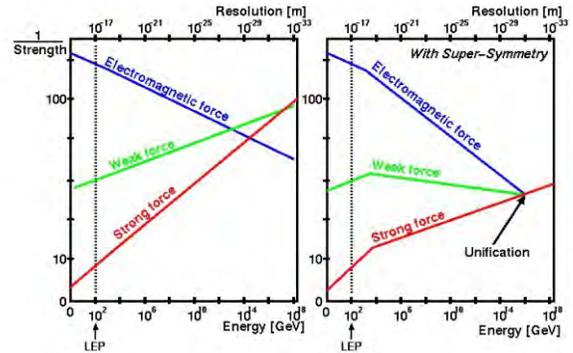


Image credit: CERN (European Organization for Nuclear Research), 2001. Via <http://edu.pyhajoki.fi/>.

Existen tres grandes problemas que podrían ser resueltos mediante la supesimetría:

1. Si realmente la supesimetría resuelve el problema de jerarquía, entonces deberían definitivamente ser descubiertas nuevas partículas supersimétricas en el LHC. De lo contrario habría que buscar otra solución al problema.

2. Si la partícula supesimétrica más ligera es realmente la materia oscura existente en el Universo, entonces los experimentos CDMS y XENON diseñados para detectarla ya deberían de haberla detectado. El estatus de no detección proveniente de estos experimentos enciende focos rojos en contra de la afirmación original de que el neutralino es realmente la materia oscura. Afortunadamente la SUSY no es el único caballo en la carrera, es decir existen muchos más candidatos alternativos para ser la materia oscura.

3. La interacción nuclear fuerte podría no unificarse completamente con las otras dos interacciones. Sin embargo la SUSY evita este problema.

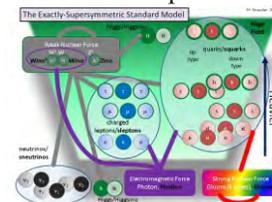


Image credit: Matt Strassler of <http://profmattstrassler.com/>.

Los grandes problemas de la SUSY no son teóricos *sino experimentales*. No se tiene hasta ahora ninguna evidencia experimental de que sea correcta. La búsqueda experimental de las partículas supersimétricas ha resultado infructuosa, incluso en el LHC en su primera corrida.

Esta solo reconfirma el Modelo Estándar con más precisión que antes. Este hecho deja a la SUSY como una teoría de promesas potenciales infinitas cuya realidad es hoy altamente cuestionable. Al parecer, la naturaleza no gusta de SUSY, al menos en su forma original.

Hasta ahora no se ha detectado en el LHC, operado por el CERN, ningún indicio de nueva física más allá del Modelo Estándar, más aún, la última ronda de los experimentos de aplastamiento de protones (protons-smashing) descartan una gran cantidad de modelos supersimétricos, los modelos mejor estudiados durante casi 50 años de la SUSY.

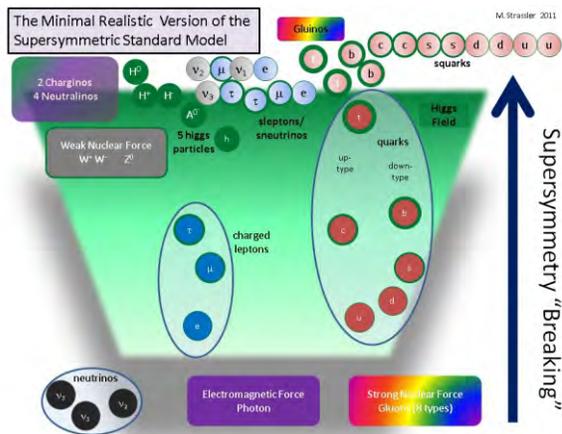


Image credit: Matt Strassler of <http://profmattstrassler.com/>.

Los resultados negativos han comenzado a producir, si bien no una crisis a gran escala en la física de partículas, si un pánico extendido. A principios de 2015 comenzará la segunda corrida del LHC, alcanzando su funcionamiento a las más altas energías para las que fue diseñado el acelerador permitiendo que los experimentos ATLAS y CMS detecten o descarten la existencia de otros compañeros supersimétricos mucho más masivos. Existen algunas versiones adicionales de la SUSY, las cuales son un poco más complejas que la simple versión de masa-energía ya descartada por el LHC, de manera que diferentes sabores de la SUSY podrían todavía ser realistas.

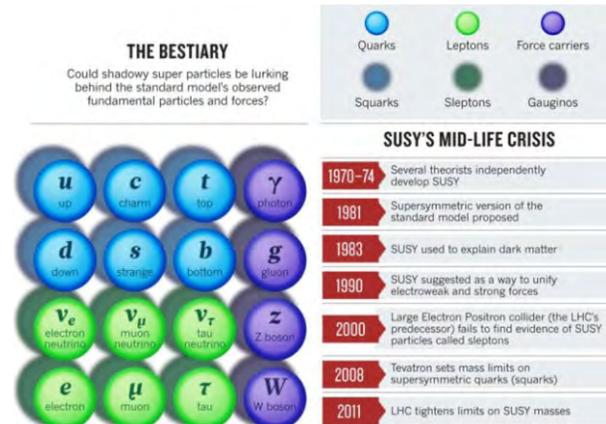


Image credit: Geoff Brumfiel from Nature.

Si al final de la segunda corrida nada nuevo aparece las teorías de cuerdas se encontrarán en una encrucijada mortal e insalvable. Actualmente se encuentran en suspenso deseando que los resultados del LHC no destruyan la mítica catedral de la física teórica estudiada ya por más de 50 años.

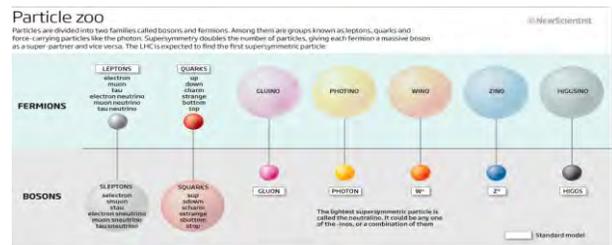
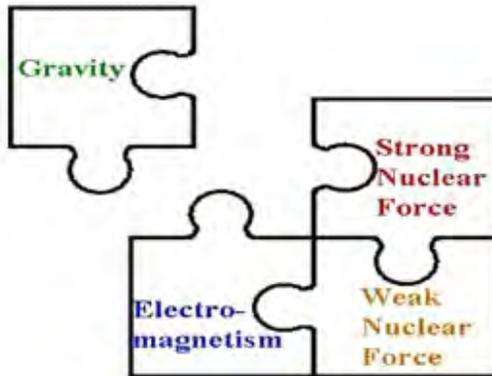


Image credit: © New Scientist.

Podría resultar que simplemente la SUSY es incorrecta y que los físicos precisan de desarrollar nuevas ideas trascendentales.

Resultó muy seductora y revolucionaria la idea propuesta con las teorías de cuerdas sobre objetos fundamentales extendidos uni-dimensionales, en lugar de puntuales, cuyos modos normales de oscilación corresponden a las partículas elementales conocidas, potencialmente capaces de unificar todas las interacciones conocidas de la naturaleza incluida la gravedad, la interacción más antigua conocida y la menos entendida a nivel microscópico, mediante la introducción de las llamadas **supersimetrías** y de las **dimensiones adicionales**, no detectables *experimental/observacionalmente*, del espacio-tiempo. Sin embargo, después de varias décadas, y ante la falta de *fenomenología* que las sustente, las teorías de cuerdas han pasado actualmente de ser *la teoría de todo*, como se propuso originalmente, a ser

tan solo una teoría cuántica de campo alternativa, diferente a la estándar cuyo principal problema era la existencia de  $10^{500}$  diferentes y disjuntas maneras de proyectar sus predicciones a nuestro mundo físico real de 4 dimensiones.

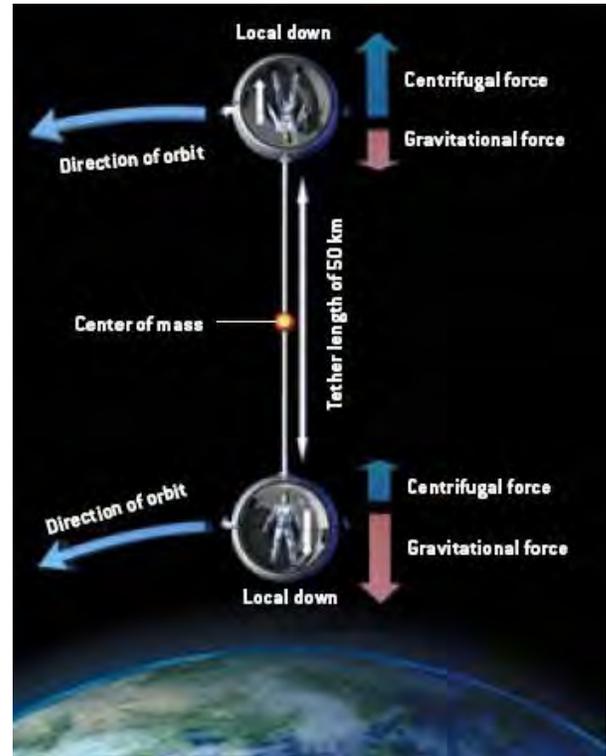


El problema de encontrar una teoría de unificación de las cuatro interacciones conocidas de la naturaleza, que por tanto incluya una teoría cuántica de la gravedad ha sido estudiado por más de 70 años asumiendo que los experimentos no proporcionan ninguna guía al respecto. Esto ha llevado a suponer que la manera de resolver el problema sería la construcción y análisis de teorías muy ambiciosas, de unificación de las interacciones, capaces de resolver todas las controversias surgidas de la posible coexistencia de la relatividad general con la mecánica cuántica.

Desafortunadamente, en el caso de la investigación en teorías multidimensionales de unificación incluyendo gravedad cuántica, dada la falta de una guía *fenomenológica/experimental*, los físicos teóricos han sido seducidos por la tentación de identificar el marco teórico supuestamente correcto basándose solamente en criterios de *origen conceptual y matemático*.

Sin embargo, en otras áreas de investigación, la disponibilidad de datos experimentales que cuestionan a las teorías existentes motiva a los teóricos a proponer modelos fenomenológicos que resuelvan las paradojas experimentales, aún cuando algunos aspectos del modelo no sean completamente satisfactorios desde una perspectiva conceptual. Usualmente, estos modelos, aparentemente no

satisfactorios, nos proveen de un importante punto de partida para la identificación de la descripción teórica correcta y conceptualmente satisfactoria del nuevo fenómeno.



Aún la teoría más consistente matemáticamente y conceptualmente satisfactoria no puede ser aceptada y adoptada sin una contundente confirmación experimental/observacional. Por tanto, resulta obligatoria la búsqueda de la fenomenología de la gravedad cuántica.

A final de cuentas cualquier teoría física y la física misma deben estar necesariamente relacionadas con los *experimentos/observaciones* para no ser consideradas solamente como *metafísica*.

#### Lecturas Adicionales

[1] Joseph Lykken and Maria Spiropulu: *Supersymmetry and the crisis in Physics*. Scientific American, Mayo 2014, 34.

[2] Gordon Kane: *The down of Physics beyond the Standard Model*. Scientific American, Junio 2003, 68.

[3] Michael Krämer: *Searching for supersymmetry*:

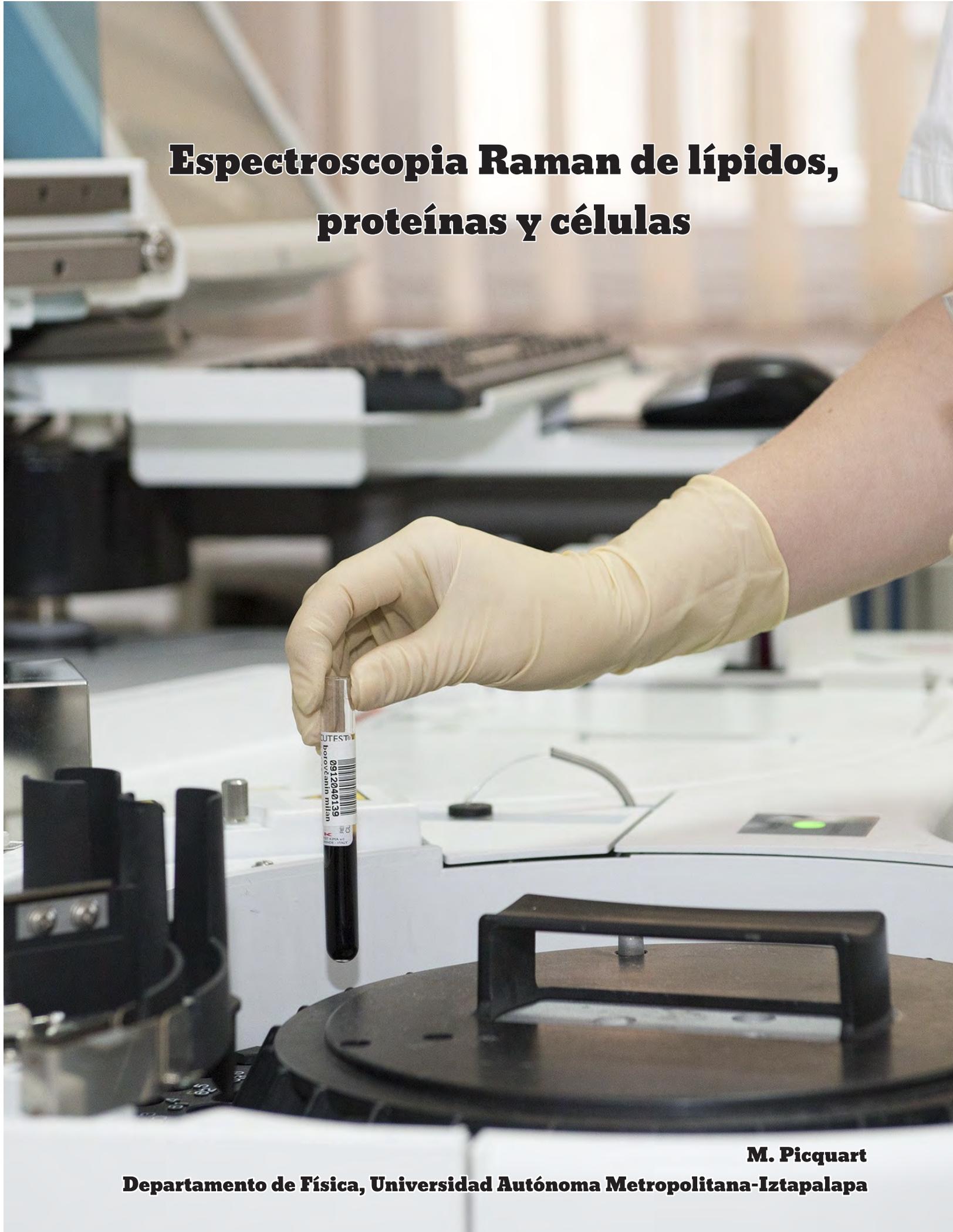
*some frustration but no despair.* Life & Physics, Science, The Guardian. 14 Marzo 2013.

[4] Sebastian Anthony: *Searching for supersymmetry: Work begins on Large Hadron Collider's 60-mile-long successor.* ExtremeTech Newsletter. Febrero 20, 2014

[5] S Natalie Wolchover and Quanta Magazine: *Supersymmetry Fails Test, Forcing Physics to Seek New Ideas.* Scientific American. Nov 29, 2012. [Supersymmetry Fails Test, Forcing Physics to Seek New Ideas - Scientific American.htm](#)

[6] Matt Strassler: *Where Stands Supersymmetry (as of 12/2013).* Of Particular Significance. Conversations About Science with Theoretical Physicist Matt Strassler. [Where Stands Supersymmetry \(as of 12\\_2013\) \\_ Of Particular Significance.htm.](#)

# **Espectroscopia Raman de lípidos, proteínas y células**



**M. Picquart**

**Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa**

## 1. INTRODUCCIÓN

La espectroscopia Raman es una técnica óptica no destructiva que permite el estudio de numerosos tipos de moléculas y sistemas, sólidos, líquidos, por ejemplo semiconductores o moléculas biológicas. El efecto Raman fue descubierto en 1928 [1], pero el estudio de moléculas biológicas con esta técnica está actualmente en pleno desarrollo, en particular gracias al desarrollo del láser a principio de los años sesenta del siglo XX y últimamente a su acoplamiento con la microscopia confocal.

Esta técnica se ha beneficiado también de los progresos tecnológicos en los detectores y sobre todo en la disminución sustancial del tiempo de adquisición de los datos experimentales.

La dispersión Raman y sus variantes, son técnicas que involucran a los estados vibracionales de las moléculas. Es el punto común con la absorción infrarroja. Sin embargo, el mecanismo de interacción de una onda electromagnética con las moléculas es diferente y las reglas de selección también son diferentes. Por lo tanto, las dos técnicas pueden conducir a espectros diferentes pero complementarios [2].

## 2. LAS CÉLULAS

Los organismos vivos se componen de células. Es la unidad básica más pequeña e importante de todo organismo vivo, que trabaja de manera autónoma. Se dividen en dos grandes grupos: células eucariotas y procariotas. Las células procariotas no tienen núcleo. Su composición es más simple que la de las células eucariotas, y se supone son el primer tipo de organización celular que hubo en el planeta.

Las células eucariotas (animales y vegetales) tienen núcleo, son más grandes que las células procariotas y se encuentran en el cuerpo humano. Poseen una disposición interna más evolucionada y compleja; el material genético está dentro del núcleo, rodeado del nucleoplasma y protegido por su propia membrana.

Pueden realizar funciones específicas, como coordinar la química celular, es decir, las reacciones internas y el metabolismo a través de la acción de sus organelos celulares.

Un esquema de una célula eucariota se presenta en la Fig. 1.

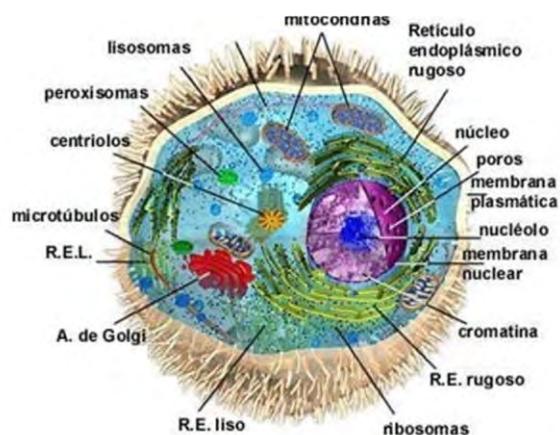


Figura 1. Esquema de una célula eucariota con los diferentes organelos celulares.

Aunque sean muy pequeñas (10 - 100  $\mu\text{m}$ ), las células eucariotas tienen una estructura básica y bien organizada. Todas poseen protoplasma, que es el citoplasma más el núcleo celular. El citoplasma, que comprende todo el volumen de la célula - salvo el núcleo -, es el medio donde se producen los cambios químicos y las reacciones metabólicas de la célula. Está compuesto por una solución acuosa denominada citosol, la cual engloba una gran cantidad de estructuras especializadas y organelos celulares.

El cuerpo humano es un sistema complejo formado por cincuenta billones de células, agrupadas en tejidos y organizadas en diferentes sistemas. Estas células poseen una membrana que separa el interior de la misma, donde se encuentra el núcleo, del medio externo; esencialmente, está compuesta de macromoléculas formadas por cadenas largas de átomos. La membrana celular es una estructura casi-fluida, en ella sus componentes pueden desplazarse. Esta fluidez implica que los componentes, en su mayoría, sólo están unidos por uniones no covalentes. La molécula primaria de la membrana celular es el fosfolípido; éste posee una "cabeza" polar (hidrofílica) y dos "colas" no polares (hidrofóbicas); esto es, los fosfolípidos son, por tanto, simultáneamente hidrofílicos e hidrofóbicos (anfipáticos). El nombre de fosfolípido de esta molécula proviene del hecho de que en la "cabeza" polar se encuentra un grupo fosfato que contiene fósforo en su estructura y la cola hidrofóbica corresponde, en su estructura, a la de una grasa.

Los lípidos son un grupo amplio y heterogéneo de compuestos insolubles en agua, pero solubles en solventes orgánicos no polares como el éter, el cloroformo o el benceno. Contienen carbono, hidrógeno, oxígeno y nitrógeno. Los lípidos pueden tener de una a tres cadenas hidrocarbonadas. En la figura 2, se presenta un esquema de un fosfolípido insaturado.

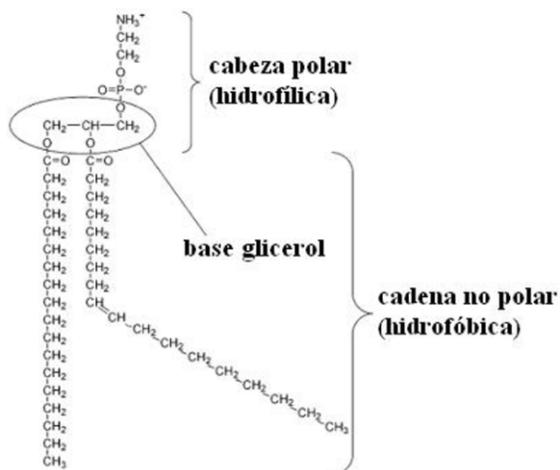


Figura 2. Esquema de un fosfolípido insaturado.

El actual modelo de membrana celular es el resultado de un largo proceso de investigación, mismo que comenzó con las observaciones indirectas que permitieron determinar que los compuestos liposolubles traspasaban fácilmente esta barrera. Este hallazgo llevó a Overton [3, 5], en 1902, a sostener que la composición de la membrana correspondía al de una delgada capa lipídica. Esta hipótesis fue probada por Görter y Grendel en 1925, en el glóbulo rojo [5]. Posteriormente, se agregó la propuesta que sostenía que en la composición de la membrana también intervenían proteínas. Hacia 1935, Danielli y Davson [6] sintetizaron los conocimientos proponiendo que la membrana celular estaba formada por una "bicapa lipídica" con proteínas adheridas a ambas caras de la misma. La integración de los datos químicos, físico-químicos y las diversas técnicas de microscopía llevó al actual modelo de "mosaico fluido" [7]. Según este modelo, que tiene gran aceptación, las membranas constan de una bicapa lipídica en la cual están inmersas diversas proteínas. El espesor de la membrana es, aproximadamente, de 7 nm. La bicapa lipídica ha sido establecida como la base universal de la

estructura de la membrana celular (Fig. 3).

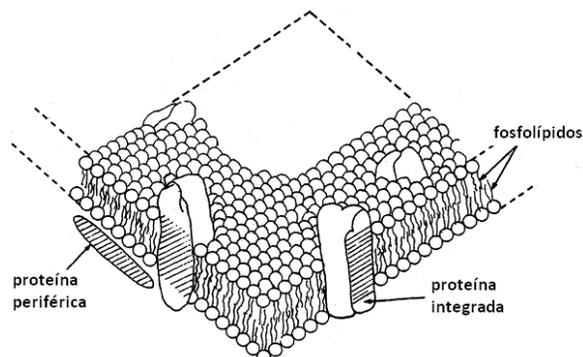


Figura 3. Modelo molecular de membrana en "mosaico fluido". El enlace entre lípidos y proteínas integradas es esencialmente de naturaleza hidrófobo, mientras que entre lípidos y proteínas periféricas es de tipo electrostático.

La estructura en bicapa permite que los grupos del extremo hidrofílico se asocien libremente con el medio acuoso, y que las cadenas hidrofóbicas de ácidos grasos permanezcan en el interior de la estructura, lejos de las moléculas de agua.

Las moléculas, lípidos, proteínas, etc. que conforman una célula viva están constituidas básicamente por cuatro elementos (C, H, O y N) que, combinados entre sí, dan origen a un gran número de compuestos. La sustancia más abundante en la célula viva es el agua y llega a representar más de 70% de su peso. Esta molécula es de gran importancia, pues la mayor parte de las reacciones intracelulares se llevan a cabo en ambiente acuoso y todos los organismos se han conformado alrededor de sus propiedades: su carácter polar, su capacidad para formar enlaces de hidrógeno y su alta tensión superficial, entre otras.

Las proteínas son las moléculas más diversas, complejas y de mayor tamaño presentes en la célula. Estas moléculas tienen formas tridimensionales, necesarias para su función específica. Las proteínas son polímeros constituidos por monómeros denominados aminoácidos. Cada aminoácido posee un grupo amino  $-NH_2$  y un grupo carboxilo  $-COOH$  unidos al mismo átomo de carbono, denominado carbono alfa. Los aminoácidos se diferencian entre sí por el tamaño de sus cadenas laterales y se agrupan en cuatro categorías, según las propiedades de estas cadenas: no polares, polares, catiónicos y aniónicos. La estructura de las proteínas puede jerarquizarse en

una serie de niveles, interdependientes. Estos niveles corresponden a: *i*) estructura primaria, que corresponde a la secuencia de aminoácidos; *ii*) estructura secundaria, que une los aminoácidos entre sí; *iii*) estructura terciaria, que define la estructura de las proteínas compuestas por un sólo polipéptido y, *iv*) estructura cuaternaria, si interviene más de un polipéptido.

Los péptidos y las proteínas están formados por un grupo que se repite a lo largo de toda la cadena, denominado enlace peptídico o grupo amida (Fig. 4). Una propiedad fundamental de este grupo es que, precisamente, establece puentes de hidrógeno con otros grupos idénticos de la misma cadena.

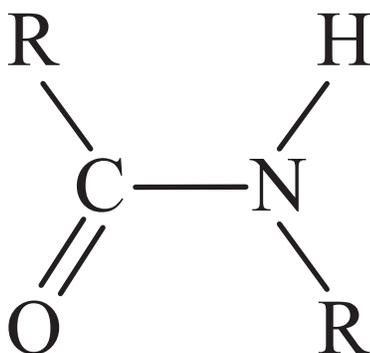


Figura 4. El enlace peptídico, base de la estructura primaria de las proteínas.

Esta propiedad condiciona el plegamiento de las proteínas en su estructura secundaria, en particular a la formación de hélices  $\alpha$  o de láminas  $\beta$ , a la cual la dispersión Raman tiene acceso que es lo que veremos en la parte 3.2.2.

### 3. ESPECTROSCOPIA RAMAN

#### 3.1 Teoría

Cuando el campo eléctrico de la luz incide sobre un átomo o una molécula los electrones son desplazados por este y se induce un momento dipolar en el átomo o la molécula orientado aproximadamente en la misma dirección que la del campo eléctrico incidente [8-10]. El dipolo inducido es pequeño siempre y cuando la intensidad del campo incidente sea pequeña. En este caso el momento dipolar inducido en el átomo o molécula  $i$  está dado por:

$$\vec{\mu}_i = \alpha \vec{E} \quad (1)$$

la constante de proporcionalidad  $\alpha$  es la polarizabilidad de la molécula y es distinta para

diferentes moléculas, representa la facilidad con que se puede orientar a la nube electrónica de estas. Si el campo incidente fluctúa con el tiempo, también lo hará el dipolo inducido; el campo eléctrico asociado a la luz hará que el dipolo del átomo o de la molécula oscile con esa frecuencia. El dipolo oscilante emitirá a su vez radiación electromagnética.

Sea  $\vec{E}$  el campo eléctrico incidente dado por  $E = E_0 \cos 2\pi\nu_0 t$ , donde  $E_0$  es la amplitud del campo eléctrico incidente y  $\nu_0$  su frecuencia. Ahora consideremos una molécula biatómica que vibra con frecuencia  $\nu_v$  con movimiento armónico simple. Sea  $q_v$  una coordenada a lo largo del eje de vibración, tendremos a un tiempo  $t$ ;

$$q_v = q_0 \cos 2\pi\nu_v t \quad (2)$$

Si la polarizabilidad varía durante la vibración entonces para una amplitud de vibración pequeña tendremos;

$$\alpha = \alpha_0 + \left. \frac{\partial \alpha}{\partial q_v} \right|_0 q_v \quad (3)$$

Sustituyendo la ecuación (2) en la ecuación (3) obtenemos:

$$\alpha = \alpha_0 + \left. \frac{\partial \alpha}{\partial q_v} \right|_0 q_0 \cos 2\pi\nu_v t \quad (4)$$

Si la radiación interacciona con la molécula entonces de (1) y (2) tenemos que:

$$\vec{\mu}_i = \alpha_0 \vec{E}_0 \left. \frac{\partial \alpha}{\partial q_v} \right|_0 + \left. \frac{\partial \alpha}{\partial q_v} \right|_0 \frac{E_0 q_0}{2} [\cos 2\pi(\nu_0 + \nu_v)t + \cos 2\pi(\nu_0 - \nu_v)t] \quad (5)$$

El primer término de la ecuación (5) describe la dispersión de Rayleigh (sin cambio de frecuencia), los restantes representan la dispersión Raman Stokes y anti-Stokes. Observamos además que se producirá dispersión Raman siempre y cuando  $\left. \frac{\partial \alpha}{\partial q_v} \right|_0 \neq 0$ , esto es la polarizabilidad de la molécula debe cambiar durante la vibración para que esta sea activa en la dispersión Raman.

#### 3.2 Resultados

En las moléculas orgánicas, los átomos C, H, O y N están ligados entre sí por enlaces con una energía característica para cada tipo: C-H, C-OH, C=O, C=C, etc. En lo que sigue, vamos a estudiar los lípidos, posteriormente las proteínas y finalmente células ya que contienen estos dos componentes.

### 3.2.1 Cadenas hidrocarbonadas y fosfolípidos

La espectroscopia Raman es una herramienta eficaz en el estudio de la estructura molecular de la membrana celular; la fluidez en la membrana se debe, esencialmente, a la isomerización de conformación de las cadenas hidrocarbonadas, a lo cual esta espectroscopia es muy sensible.

El punto común de estas moléculas es poseer por lo menos una cadena hidrocarbonada. Las moléculas más sencillas de este tipo son el polietileno (PE) y los alcanos, conformados por una cadena lineal de grupos metilenos, terminada en sus dos extremos por un grupo metilo. Veamos algunos de los resultados conocidos sobre la espectroscopia Raman de estos sistemas. La cadena de PE está constituida sólo por grupos metilenos CH<sub>2</sub>. Para un estudio detallado, el lector puede consultar las referencias [11-15].

El PE presenta 8 modos de vibración activos en Raman: cuatro modos de deformación de los grupos CH<sub>2</sub> con las bandas 1174 cm<sup>-1</sup>, 1295 cm<sup>-1</sup>, 1382 cm<sup>-1</sup> y 1440 cm<sup>-1</sup>, respectivamente denominados *rocking*, *twisting*, *wagging* y *scissors*; dos modos de elongación, simétrico y anti simétrico, de los CH<sub>2</sub> con bandas en 2845 cm<sup>-1</sup> y 2880 cm<sup>-1</sup>; dos modos de elongación, anti simétrico y simétrico de la cadena de carbonos C-C-C, respectivamente en 1065 cm<sup>-1</sup> y 1133 cm<sup>-1</sup>.

En los fosfolípidos se encuentran los mismos modos de vibración mencionados anteriormente; sin embargo, debido a la cabeza polar de la molécula, aparecen algunos modos adicionales. En el caso de cadenas insaturadas también aparecen nuevos modos de vibración. En la Tabla 1, se encuentran frecuencias características de los modos de estas moléculas.

Tabla 1. Atribuciones de las principales vibraciones de los fosfolípidos.

Modo de vibración	Número de onda (cm <sup>-1</sup> )
-C-H insaturado	3010
-CH <sub>3</sub> anti simétrico	2950
-CH <sub>3</sub> simétrico	2880
-CH <sub>2</sub> anti simétrico	2920
-CH <sub>2</sub> simétrico	2850
C=O éster	1730
-CH <sub>2</sub> deformación	1460
PO <sub>2</sub> <sup>-</sup> anti simétrico	1230
PO <sub>2</sub> <sup>-</sup> simétrico	1085
OC-O-C éster	1170
C-O-P elongación	1045
CN elongación (CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> N*	970

Las vibraciones C-H contribuyen con varias bandas de vibración en la región 2800-3000 cm<sup>-1</sup>. La banda Raman cerca de 2890 cm<sup>-1</sup> es muy sensible al arreglo lateral de las cadenas; su intensidad disminuye cuando aumenta el desorden intramolecular de las cadenas (isomerización trans-izquierda). La banda situada a 2850 cm<sup>-1</sup> se debe a las vibraciones de elongación ( $\nu_{CH}$ ) simétricas; conforme aumenta el desorden, su intensidad permanece relativamente constante. Por lo tanto, el cociente  $I_{2890}/I_{2850}$  es un indicador en el estudio de las transiciones de fase de los fosfolípidos. En la Fig. 5 se presentan los cambios en la región de elongación de los CH y de los modos de la cadena hidrocarbonada, entre 10°C y 45°C para la 1,2-dihexadecanoil-sn-glicero-3-fosfocholina o dipalmitoil-fosfatidilcholina (DPPC).

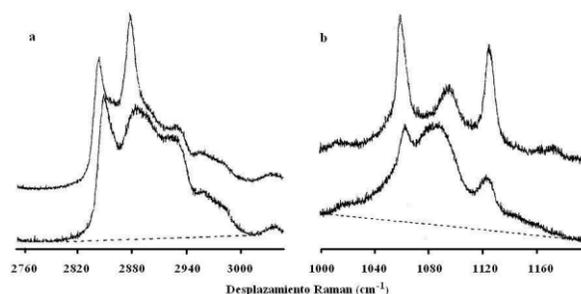


Figura 5. Espectro Raman de una solución acuosa de DPPC a pH 6. a) Modos de elongación de los CH, b) Modos del esqueleto C-C, a 10°C (abajo) y a 45°C (arriba). Reproducido de [16].

### 3.2.2 Proteínas

EL grupo peptídico está compuesto por dos grupos funcionales: N-H y C=O. En el espectro Raman se pueden observar hasta 9 bandas características de este grupo, denominadas amida A, B, I, ..., VII. Las bandas amida I y amida II son las más importantes del espectro ya que son muy sensibles a la estructura secundaria de la proteína. En la Tabla 2, se encuentran las principales bandas de vibración del grupo peptídico.

Tabla 2. Vibraciones del grupo peptídico:  $\nu$ : elongación,  $\delta$ : deformación, RF: resonancia de Fermi, las vibraciones amida V, VI y VII son vibraciones fuera del plano [17, 18]; RF: resonancia de Fermi.

Región (cm <sup>-1</sup> )	Nombre	Atribución
~3300	amida A	$\delta_{\text{N-H}}$
~3080	amida B	armónico amida II + RF $\nu_{\text{N-H}}$
1600 – 1700	amida I	$\nu_{\text{C=O}}$ (80%) + $\nu_{\text{C-N}}$ (10%) + $\delta_{\text{N-H}}$ (10%)
1520 – 1580	amida II	$\delta_{\text{N-H}}$ (60%) + $\nu_{\text{C-N}}$ (40%)
1240 – 1310	amida III	$\nu_{\text{C-N}}$ (30%) + $\delta_{\text{N-H}}$ (30%) + $\nu_{\text{C-O}}$ (10%) + $\delta_{\text{O-C-N}}$ (10%)
625 – 770	amida IV	$\delta_{\text{O-C-N}}$ (40%)
640 – 800	amida V	fuera del plano $\delta_{\text{N-H}}$
530–610	amida VI	fuera del plano $\delta_{\text{C=O}}$
~200R	amida VII	fuera del plano $\nu_{\text{C-N}}$

Además del grupo amida, los residuos son identificados por la presencia de vibraciones de grupos CH que aparecen cerca de 2900 cm<sup>-1</sup> para las vibraciones de elongación y cerca de 1450 cm<sup>-1</sup> para las vibraciones de deformación. Algunos aminoácidos pueden presentar una banda característica que permite identificarlos, como es el caso del triptófano que presenta una banda fina y generalmente intensa en 1002 cm<sup>-1</sup>.

Las principales vibraciones que contribuyen al espectro Raman de proteínas se deben a los diferentes enlaces del grupo peptídico; éstos producen varias contribuciones en diferentes regiones del espectro. Las frecuencias más intensas en Raman corresponden a los modos amida I y amida III, cuyas frecuencias se relacionan con la estructura secundaria de las proteínas. El modo amida I se encuentra entre 1600 y 1700 cm<sup>-1</sup> y se debe principalmente a la vibración de elongación C=O del grupo peptídico. El modo amida III se encuentra entre 1200 y 1300 cm<sup>-1</sup> y se debe principalmente a un acoplamiento entre la vibración de deformación del grupo N-H y la de elongación del grupo C-N. La vibración amida II que se observa en absorción infrarroja no es activa en Raman. Por otra parte, algunos residuos poseen un espectro Raman intenso y muy característico, el cual conviene considerar para determinar entornos particulares.

Tabla 3. Regiones de los modos de vibración amida I y amida III de los diferentes tipos de estructura secundaria de proteínas.

Estructura secundaria	Amida I (cm <sup>-1</sup> )	Amida III (cm <sup>-1</sup> )
Hélice $\alpha$	1645 – 1660	1270 – 1300
Lámina $\beta$	1665 – 1680	1230 – 1240
Vueltas $\beta$	1662 – 1677	1255 – 1300
Desordenada	1660 – 1665	1240 – 1260

Un aspecto importante en espectroscopia Raman de proteínas es saber cómo su estructura modifica los modos de vibración. Como ya lo señalamos, las frecuencias de los modos amida I y amida III se

relacionan con la estructura secundaria de la proteína (Tabla 3).

Como ya fue mencionado anteriormente, algunos aminoácidos poseen señales intensas y características: *i*) dos cisteínas pueden formar un puente de sulfuro S-S (500 - 550 cm<sup>-1</sup>) por oxidación del grupo sulfhídrico -S-H (2550-2600 cm<sup>-1</sup>); *ii*) la tirosina tiene un espectro Raman complejo, no obstante, las bandas (doblete) a 830 cm<sup>-1</sup> y 850 cm<sup>-1</sup> son útiles para determinar el entorno local de este residuo; *iii*) la histidina se caracteriza por la vibración de su núcleo imidazol hacia 1490 cm<sup>-1</sup>, pero sus bandas Raman no son sensibles a las modificaciones estructurales; *iv*) la fenilalanina posee varias bandas debido al núcleo aromático, tiene una banda muy intensa hacia 1005 cm<sup>-1</sup>; *v*) el triptófano posee varias bandas, en particular el doblete a 1340 cm<sup>-1</sup> y 1360 cm<sup>-1</sup> es sensible al entorno, un cociente  $I_{1360}/I_{1340}$  superior a 1 indica un entorno hidrófobo (no polar).

### 3.2.3 Tejidos y células

En los últimos años, por su capacidad para aportar información detallada sobre la composición química, la dispersión Raman se ha orientado hacia el estudio de tejidos biológicos y células. Generalmente, este estudio se acompaña del uso de métodos estadísticos para la determinación de las diferencias espectrales.

En la Fig. 6 se presenta el espectro Raman de una célula HeLa (célula cancerosa de cultivo derivada de una muestra de cáncer cérvico-uterino) con las principales atribuciones de las bandas.

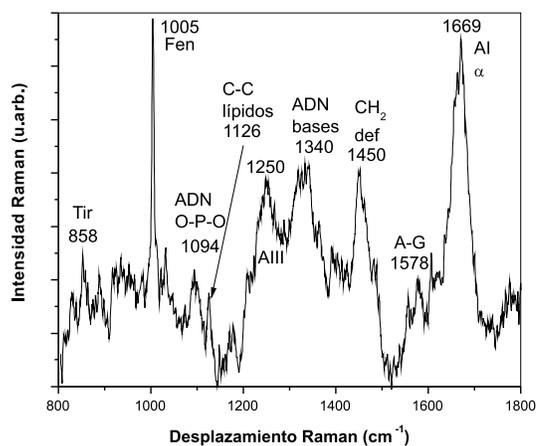


Figura 6. Espectro Raman de una célula HeLa.

En esta figura podemos observar bandas que corresponden a lípidos (C-C, CH<sub>2</sub>, O-P-O) y a proteínas (Amida I, Amida III, Fen, Tir) pero también algunas bandas que provienen de las vibraciones del ADN en el núcleo de la célula.

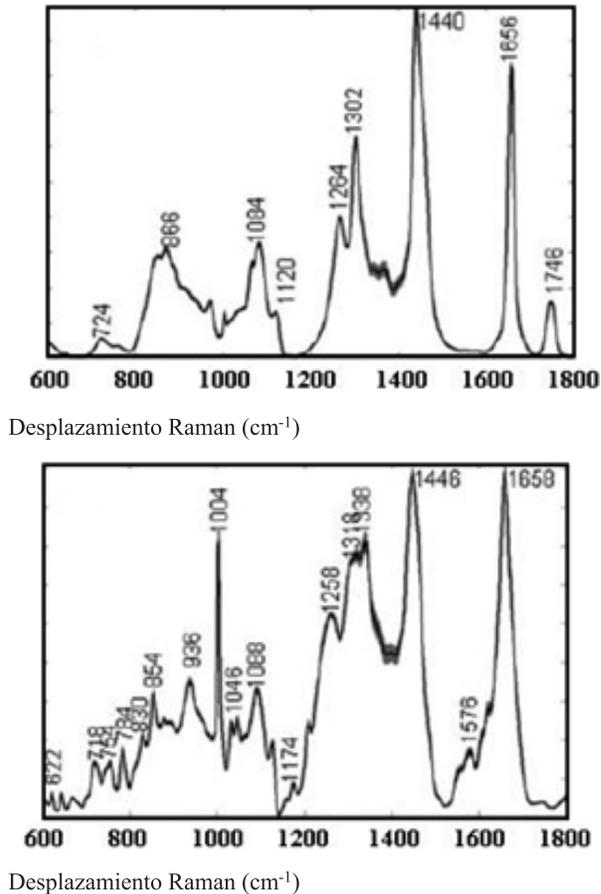
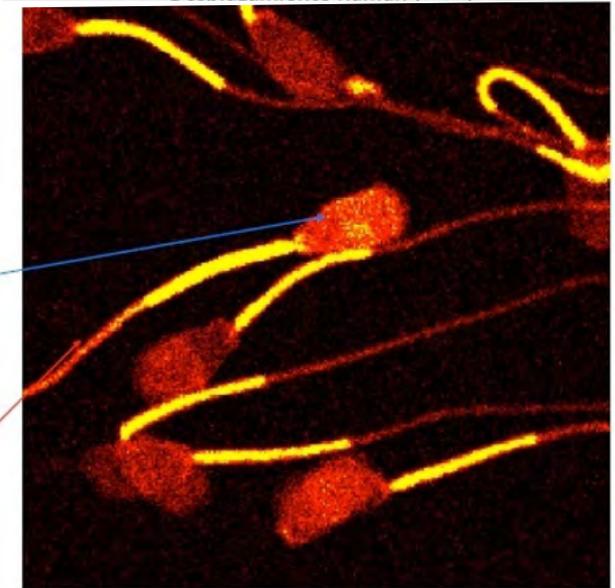
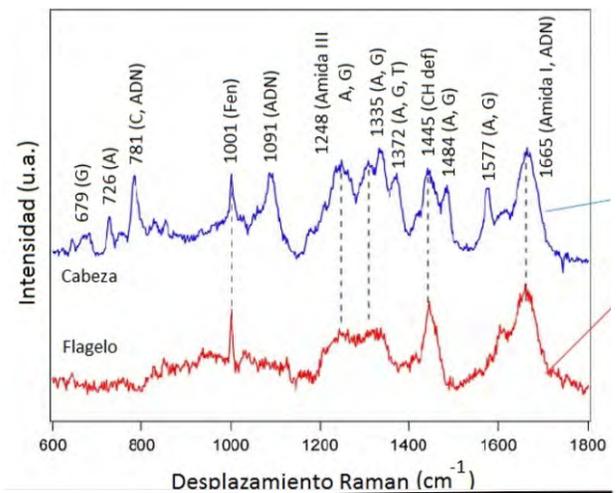


Figura 7. Espectro Raman promedio de un tejido mamario sano con nódulos linfáticos (arriba) y de un tumor (abajo). Adaptada de [19].

En un trabajo reciente [19], se utilizó la espectroscopia Raman para analizar muestras de tejido de glándula mamaria de ratones, correspondiente a tejido sano, con tumor maligno y con mastitis. El espectro Raman de glándulas mamarias normales con nódulos linfáticos es dominado por la contribución de los lípidos y algunas bandas a 762 cm<sup>-1</sup>, 868 cm<sup>-1</sup> y 1004 cm<sup>-1</sup>, que reflejan la composición proteica del tejido. El espectro Raman de los tumores mamarios es sensible al incremento en proteína y, por lo tanto, se refleja la disminución relativa de las bandas de lípidos. Se

observa una fuerte disminución en la intensidad de la banda a 1746 cm<sup>-1</sup>, atribuida a la vibración de elongación de los C=O lipídicos, la banda a 1440 cm<sup>-1</sup> ( $\delta_{CH}$ ) disminuye y aparecen nuevas e intensas bandas de proteínas en 622, 642, 830, 854, 936, 1004, 1174, 1258, 1318, 1338, 1446 y 1576 cm<sup>-1</sup> (Fig. 7). Sobre este tema existe una bibliografía considerable; como ejemplo, pueden consultarse algunos de los trabajos desarrollados por diferentes grupos [20-30].

En la figura 8, se presenta el espectro Raman obtenido en la cabeza y en el flagelo de un espermatozoide bovino.



### Espermatozoides bovinos

Figura 8. Espectro Raman de la cabeza y el flagelo de un espermatozoide bovino.

Comparando los dos espectros, se puede observar que el espectro de la cabeza es idéntico al del flagelo con la adición de las bandas correspondiendo al ADN del núcleo que se encuentra en la cabeza del espermatozoide.

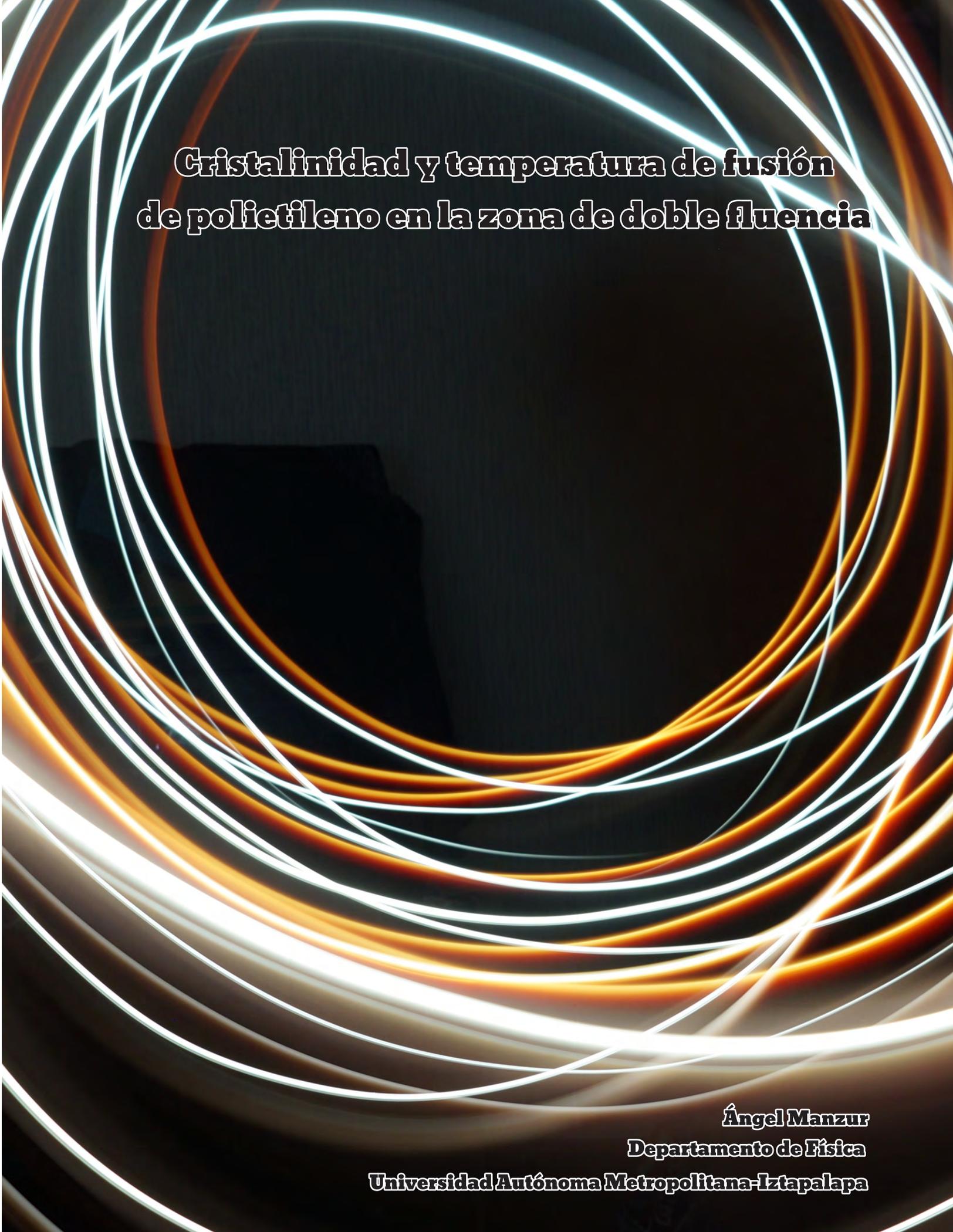
#### 4. CONCLUSIÓN

En los últimos años, la dispersión Raman está muy asociada a aplicaciones biológicas y médicas, entre otras. El aumento de la sensibilidad de los detectores ha sido un factor importante en este desarrollo por el ahorro en tiempo de acumulación de espectros. La dificultad mayor de estos estudios está en la complejidad de las moléculas o sistemas investigados que pueden necesitar métodos estadísticos de análisis de los espectros. El porvenir está en la utilización de la dispersión Raman como método diagnóstico.

#### Referencias

- [1] C.V. Raman, K.S. Krishnan, A new type of secondary radiation, *Nature* 121: 501-502 (1928).
- [2] P. Lasch y J. Kneipp, eds. *Biomedical vibrational spectroscopy*. Hoboken: John Wiley & sons (2008).
- [3] E. Overton. Beitrage zur allgemeinen Muskel- und Nervenphysiologie. *Pflug. Arch. ges. Physiol.* 92, 115-280 (1902)
- [4] E. Overton. Beiträge zur allgemeinen Muskel- und Nervenphysiologie II. Mittheilung. Ueber die Unentbehrlichkeit von Natrium- (oder Lithium-) Ionen für den Contractionsact des Muskels *Pflug. Arch. ges. Physiol.* 92, 346-386 (1902)
- [5] E. Görter and F. Grendel. On bimolecular layers of lipoids on the chromocytes of the blood. *J. Exp. Med.* 41, 439-443 (1925)
- [6] J.F. Danielli, H. Davson. A contribution to the theory of permeability of thin films. *J. Cell. Comp. Phys.* 5, 495-508 (1935)
- [7] S.J. Singer, G.L. Nicolson. The Fluid Mosaic Model of the Structure of Cell Membranes. *Science* 175, 720-731 (1972)
- [8] D.C. Harris, M.D. Bertolucci, *Symmetry and Spectroscopy: An introduction to vibrational and electronic spectroscopy*, New York, EUA: Dover Publications, (1989)
- [9] K. Nakamoto, *Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds*, New York, EUA: Wiley-Interscience Publication (1997)
- [10] A. Anderson (Ed.), *The Raman Effect*, Marcel Dekker Inc., New York (1971)
- [11] G. Socrates. *Infrared and Raman Characteristic Group Frequencies: Tables and Charts*. New York: John Wiley & Sons (2004)
- [12] T.P. Lin and J.L. Koenig. A method for the complete vibrational analysis of the isolated polyethylene chain. *J. Mol. Spectrosc.* 9, 228-243 (1962)
- [13] R.G. Snyder. A revised assignment of the B<sub>2g</sub> methylene wagging fundamental of the planar polyethylene chain. *J. Mol. Spectrosc.* 23, 224-228 (1967)
- [14] M. Tasumi and S. Krimm. Crystal vibrations of polyethylene. *J. Chem. Phys.* 46, 755-766 (1967)
- [15] M. Tasumi, S. Krimm. Vibrational analysis of chain folding in polyethylene crystals. *J. Polymer Sci. Part A-2: Polymer Phys.* 6, 995-1010 (1968)
- [16] M. Picquart. Interaction of antibiotics Lasalocid and Monensin with model membranes evidenced by Raman spectroscopy and FT-IR. *Rev. Mex. Fis.* 46, 166-173 (2000)
- [17] J. Bandekar, S. Krimm. Vibrational analysis of peptides, polypeptides, and proteins: Characteristic amides bands of beta-turns. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 76, 774-777 (1979)
- [18] S. Krimm, J. Bandekar. Vibrational spectroscopy and conformation of peptides, polypeptides, and proteins. *Adv. Protein Chem.* 38, 181-364 (1986)
- [19] R.E. Kast, G.K. Serhatkulu, A. Cao, A.K. Pandya, H. Dai, J.S. Thakur, V.M. Naik, R. Naik, M.D. Klein, G.W. Auner, R. Rabah. Raman spectroscopy can differentiate malignant tumors from normal breast tissue and detect early neoplastic

- changes in a mouse model. *Biopolymers*. 89, 235-241 (2007)
- [20] L.P. Choo-Smith, H.G. Edwards, H.P. Endtz, J.M. Kros, F. Heule, H. Barr, J.S. Jr. Robinson, H.A. Bruining, G.J. Puppels. Medical applications of Raman spectroscopy: from proof of principle to clinical implementation. *Biopolymers*. 67, 1-9 (2002)
- [21] J.R. Baena, B. Lendl, Raman spectroscopy in chemical bioanalysis. *Curr. Opin. Chem. Biol.* 8, 534-539 (2004)
- [22] A.P. Esposito, C.E. Talley, T. Huser, C.W. Hollars, C.M. Schaldach, S.M. Lane, Analysis of single bacterial spores by micro-Raman spectroscopy. *Appl. Spectrosc.* 57, 868-871 (2003)
- [23] N.S. Eikje, K. Aizawa, Y. Ozaki, Vibrational spectroscopy for molecular characterisation and diagnosis of benign, premalignant and malignant skin tumours. *Biotechnol. Annu. Rev.* 11, 191-225 (2005)
- [24] A.S. Haka, K.E. Shafer-Peltier, M. Fitzmaurice, J. Crowe, R.R. Dasari, M.S. Feld, Diagnosing breast cancer by using Raman spectroscopy. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. 102, 12371-12376 (2005)
- [25] J.R. Mourant, K.W. Short, S. Carpenter, N. Kunapareddy, L. Coburn, T.M. Powers, J.P. Freyer, Biochemical differences in tumorigenic and nontumorigenic cells measured by Raman and infrared spectroscopy. *J. Biomed. Opt.* 10, 031106 (2005)
- [26] R. Malini, K. Venkatakrishna, J. Kurien, M.P. K. L. Rao, V.B. Kartha, C.M. Krishna, Discrimination of normal, inflammatory, premalignant, and malignant oral tissue: A Raman spectroscopy study. *Biopolymers*. 81, 179-193 (2005)
- [27] M.S. Ibelings, K. Maquelin, H.P. Endtz, H.A. Bruining, G.J. Puppels. Rapid identification of *Candida* spp. in peritonitis patients by Raman spectroscopy. *Clin. Microbiol. Infect.* 11, 353-358 (2005)
- [28] C. Mello, D. Ribeiro, F. Novaes, R.J. Poppi. Rapid differentiation among bacteria that cause gastroenteritis by use of low-resolution Raman spectroscopy and PLS discriminant analysis. *Anal. Bioanal. Chem.* 383, 701-706 (2005)
- [29] C. Medina-Gutiérrez, J. Luis Quintanar, C. Frausto-Reyes and R. Sato-Berrú. The application of NIR Raman spectroscopy in the assessment of serum thyroid-stimulating hormone in rats. *Spectrochim. Acta Part A: Mol. Biomol. Spectrosc.* 61, 87-91 (2005)
- [30] P.R.T. Jess, D.D.W. Smith, M. Mazilu, K. Dholokia, A.C. Riches y C.S. Herrington. Early detection of cervical neoplasia by Raman spectroscopy. *Int. J. Cancer* 121, 2723-2728 (2007)



**Cristalinidad y temperatura de fusión  
de polietileno en la zona de doble fluencia**

**Ángel Manzur**  
**Departamento de Física**  
**Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa**

**Resumen**

El fenómeno de doble fluencia fue estudiado, después de retirar la deformación uniaxial, en especímenes de polietileno deformados a una rapidez constante y a distintas elongaciones. El grado de cristalinidad y la temperatura de fusión fueron determinados como función de la elongación a la cual fueron sometidos. Los resultados señalan que se produce una fusión parcial seguida de una recristalización.

**Introducción**

Una definición general de fluencia (o cedencia) es el punto en que un material deja de deformarse de una manera reversible y empieza a experimentar deformación permanente. Convencionalmente, el punto de fluencia observado en una prueba de tensión en polímeros se identifica con el máximo local exhibido en la curva esfuerzo-deformación. El fenómeno de fluencia en polímeros semicristalinos se asocia con el cambio morfológico de una estructura esferulítica a una fibrilar [1-3].

Evidencia experimental reportada para varias muestras de polímeros semicristalinos sujetas a deformación tensil uniaxial ha mostrado la existencia de dos puntos de fluencia, o sea, dos máximos locales, fenómeno llamado de doble fluencia. La doble fluencia se observó primero en varios polietilenos teniendo diferentes propiedades (tales como peso molecular, grado de cristalinidad, historia térmica) y bajo varias condiciones experimentales (como temperatura y rapidez de deformación) [4-20].

Se pensaba que la doble fluencia era una característica exclusiva de polímeros semicristalinos; sin embargo, también se ha observado en mezclas conteniendo un polímero amorfo y en un copolímero amorfo [21]. Los modelos desarrollados para explicar los procesos en polímeros semicristalinos no pueden aplicarse directamente a un polímero amorfo [21] y a una mezcla amorfo/semicristalino [22].

El fenómeno depende críticamente de una variedad de factores. La curva esfuerzo-deformación puede tener magnitudes del esfuerzo comparables en ambos máximos o un valor predominante de uno de ellos. El primero es predominante ante extremas condiciones experimentales de bajas temperaturas,

altas rapidezces de deformación o altos grados de cristalinidad. El segundo máximo es predominante ante las opuestas condiciones extremas. Es indudable que al menos un mecanismo diferente de deformación ocurre en cada punto de fluencia. Las explicaciones que se han dado no han sido únicas porque varios mecanismos están involucrados.

Algunos modelos y mecanismos se han reportado para explicar la formación de la doble fluencia. Por ejemplo, se propuso que los dos puntos de fluencia se debían al deslizamiento entre sí de los bloques cristalinos y al corte homogéneo de los bloques de cristal [5,7,10,23].

Resultados de experimentos tensiles [6,13] efectuados a temperatura ambiente mostraron que el mecanismo que opera en el primer punto de fluencia marcaba el inicio de deformaciones plásticas, las cuales son lentamente recuperables, mientras que el mecanismo que gobierna el segundo punto de fluencia produce una verdadera deformación plástica y estaba asociado con un agudo acuellamiento de las muestras.

A partir de estudios en un conjunto de polietilenos de características diferentes y bajo condiciones experimentales distintas, una explicación cualitativa se basó en el postulado que el mecanismo de fusión parcial y recristalización pueden explicar el origen del fenómeno de doble fluencia [4,8]. Este modelo fue cuestionado porque suponía que el polímero debía tener una amplia distribución de espesores de las láminas cristalinas [5,7,12]. Después se mostró [7] que la distribución del espesor de los cristales no es el factor principal de la doble fluencia, aunque puede afectar las condiciones de su aparición.

La explicación fusión parcial-recristalización fue reforzada por nuestros estudios sobre las variaciones del grado de cristalinidad durante la deformación causadas por el efecto de la rapidez de deformación en muestras de polietileno sometidas a elongación uniaxial [16-17]. Las rapidezces de deformación empleadas correspondieron a los casos en que el primer máximo de fluencia es dominante, los dos máximos tienen magnitudes similares, o el segundo máximo es dominante. Se usó la técnica de dispersión de rayos X y los resultados mostraron un decremento seguido por un incremento de la cristalinidad alrededor del segundo punto de

fluencia; estos resultados sugirieron que realmente fusión y recristalización ocurrían.

Mucho del trabajo previo sobre el fenómeno de doble fluencia exhibido por polímeros se refirió a la correlación del comportamiento esfuerzo-deformación y la deformación de la porción cristalina del material [5,7,10,13,15], y más recientemente con la correlación de las propiedades mecánicas y propiedades cristalinas [16,17]. Aunque se tenía una descripción de la evolución de la cristalinidad, no se tenían datos experimentales para correlacionar el grado de cristalinidad y la temperatura de fusión.

Por otra parte, se sabe de muestras de polietileno que habían sido deformadas más allá de la fluencia y que se les permitió que relajaran sin el esfuerzo externo, después de una hora la cristalinidad podría ser mayor que el valor que tenía antes de ser deformada [15]. En otro tipo de polímero se encontró que si la deformación aplicada no excedía la correspondiente a la de la segunda fluencia, al dejarla relajar sin el esfuerzo externo, a los pocos días la muestra estaba virtualmente isotrópica; pero si era deformada en el intervalo de la segunda fluencia, la anisotropía era evidente [24]. Por tanto, aunque los fenómenos de relajación siempre están presentes a la temperatura ambiente, algunas propiedades térmicas que los especímenes retienen después que el esfuerzo externo ha sido retirado pueden ser medidas.

Debido a que la fusión parcial y la recristalización ocurren durante la deformación, se espera que algunos cambios en las propiedades térmicas permanezcan en los especímenes sin el esfuerzo externo. El comportamiento a la fluencia de un polietileno se analizó mediante la determinación del grado de cristalinidad y la temperatura de fusión, como función de la deformación uniaxial en el estado liberado (el estado liberado se obtiene a partir del estado tenso al quitar el esfuerzo). Estas propiedades térmicas fueron analizadas usando calorimetría de barrido diferencial [19].

### Experimento

**Pruebas mecánicas.** El polietileno lineal de baja densidad utilizado fue un producto de Dow Chemical (Dowlex 2101) con densidad de 0.924 g/cm<sup>3</sup>. Cintas de espesor promedio de 1.7 mm fueron obtenidas en un extrusor Brabender de husillo simple

a la temperatura de 150 °C y a una rapidez angular de 70 rpm. De estas cintas se cortaron especímenes con la forma estándar de mancuerna con un ancho central de 7.5 mm.

Los experimentos de deformación uniaxial fueron realizados a temperatura ambiente (25 °C) en una máquina Instron (4502). La separación pinza-pinza fue de 27.0 mm; los especímenes fueron deformados a una rapidez de 10 mm/min hasta elongaciones predeterminadas en el intervalo donde la doble fluencia ocurre; en cada prueba se usó un espécimen nuevo. Esta rapidez de deformación corresponde al caso cuando los dos máximos tienen magnitudes similares [16].

El esfuerzo nominal ( $\sigma$ ) se define como el cociente entre la fuerza de deformación y la sección transversal inicial de las muestras; la deformación nominal ( $\epsilon$ ) se define como el cociente entre la longitud de la muestra deformada entre la longitud inicial. La curva  $\sigma$ - $\epsilon$  se llama esfuerzo-deformación nominal.

Para poder comparar estos resultados con los obtenidos con anterioridad [16] las condiciones experimentales deben ser las mismas: la muestra en estado tenso fue mantenida por 30 minutos, luego el esfuerzo fue quitado para tener el estado liberado con una espera adicional de 30 minutos antes de la determinación de las propiedades térmicas. Este fue el tiempo requerido en los experimentos con rayos X.

**Mediciones calorimétricas.** Para determinar el porcentaje de cristalinidad,  $\phi$ , y la temperatura de fusión de las muestras en el estado liberado, se utilizó la calorimetría de barrido diferencial (DSC) con el aparato TA Instruments (2920). Especímenes de 6 a 7 mg fueron cortados del centro de muestras en estado liberado y colocadas en charolas estándar de aluminio. Los termogramas de fusión fueron registrados a una rapidez de calentamiento de 10 °C/min en atmósfera de nitrógeno. El porcentaje de cristalinidad fue calculado a partir del calor específico de fusión del espécimen y tomando el calor específico de fusión de polietileno perfectamente cristalino como 293 J/g [25]. La temperatura de fusión se tomó en el pico de la endoterma.

## Resultados y discusión

**Esfuerzo-deformación.** Para obtener el intervalo de elongaciones donde ocurre la doble fluencia, un espécimen fue deformado hasta una elongación más allá de la región de interés, exhibiendo la curva esfuerzo-deformación nominal ( $\sigma$ - $\epsilon$ ); parte de la curva es mostrada en la Figura 1. La curva fue deconvolucionada para definir la elongación de los máximos de fluencia.

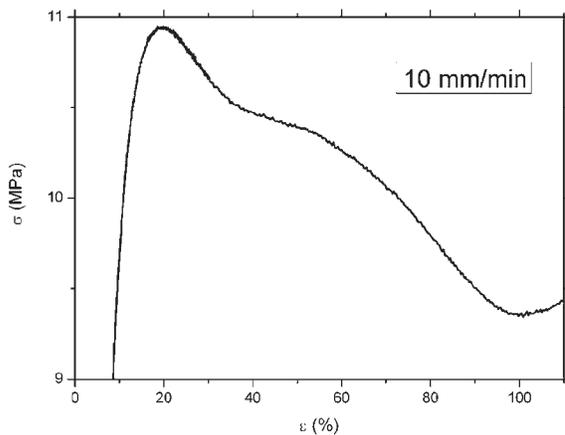


Figura 1. Curva esfuerzo-deformación nominal en la región de doble fluencia para un espécimen estirado a 10 mm/min a temperatura ambiente.

El primer punto de fluencia ocurre en la elongación  $\epsilon=20.0\%$ , luego el esfuerzo decrece lentamente mientras la deformación se incrementa. Después el esfuerzo empieza a caer rápidamente, indicando que un segundo máximo de fluencia ocurre en  $\epsilon=47.6\%$ . Esto quiere decir que en el proceso de fluencia hay al menos dos mecanismos que dan origen a estos dos máximos. La forma de la curva es típica para este polímero a esta rapidez de deformación intermedia [17], donde el valor del esfuerzo del segundo máximo es ligeramente menor que el valor del primero. Visualmente se observó el acuellamiento alrededor de la segunda fluencia, como se ha reportado [6-8,12,16-17]. Los tres factores importantes que pueden afectar la forma de la curva esfuerzo-deformación son la temperatura de deformación, la rapidez de deformación y la cristalinidad inicial [5-8,16].

**Cristalinidad.** Para correlacionar las propiedades mecánicas mostradas en la curva  $\sigma$ - $\epsilon$  con los cambios de las propiedades cristalinas, la cristalinidad y la temperatura de fusión fueron analizadas como

función de las elongaciones a las que las muestras fueron sometidas. El interés es determinar la evolución de la cristalinidad como una función de la elongación. La fracción cristalina  $\phi$  en el estado liberado fue determinada a partir del cambio de entalpía en los termogramas de DSC en el intervalo de temperatura de 50 a 135 °C, que cubre la historia térmica dejada por la deformación.

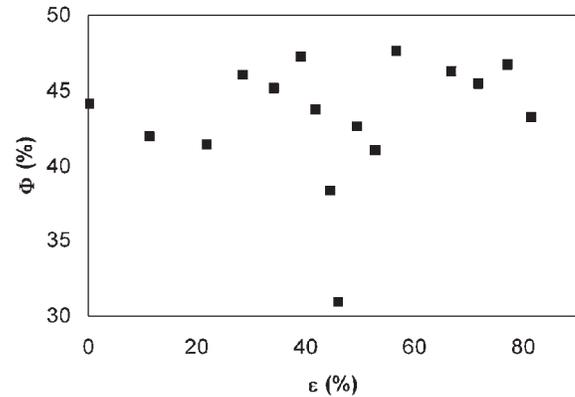


Figura 2. Grado de cristalinidad como función de la elongación a que el espécimen fue sometido antes de quitar el esfuerzo.

Debido que este estudio está enfocado en las propiedades térmicas en la región de la doble fluencia, pocos experimentos se hicieron en elongaciones menores al primer punto de fluencia. Los valores de la cristalinidad aparecen en la Figura 2. Cambian considerablemente en las diferentes etapas de la deformación como consecuencia de los varios mecanismos involucrados. Lo que aquí se enfatiza es la correlación de los cambios en la cristalinidad con las propiedades mecánicas principalmente en la zona de la segunda fluencia, i.e. arriba de la elongación de 30%. Aunque la incertidumbre para cada punto es pequeña, en todos los casos es menor que el tamaño del símbolo, la dispersión de los valores proviene principalmente del efecto de los diferentes mecanismos.

La cristalinidad del espécimen sin deformación fue de  $\phi=44.1\%$ . Después, con el progreso de la deformación, los valores  $\phi$  presentan decrementos e incrementos con valores extremos de 31.0% y 47.7%, respectivamente.

Antes de que ocurra la primera fluencia, el valor de muestra un pequeño decremento de 44.1% en  $\epsilon=0\%$

a 42% en  $\epsilon=11.2\%$ , i.e. permanece casi constante en esta primera zona. El decremento puede asociarse a fractura de láminas cristalinas; esta fragmentación, a su vez, puede causar decristalización. En la zona entre los dos puntos de fluencia la cristalinidad muestra un incremento significativo en el intervalo de elongación de 30 a 40%, el cual puede asociarse a cristalización inducida por el esfuerzo. Debido al relativamente bajo nivel de cristalinidad inicial, partes de las cadenas que están presentes son todavía potencialmente cristalizables. Para un polietileno ramificado con densidad de 0.92 se puede esperar un máximo de cristalinidad de alrededor de 50%. De esta manera, existe la posibilidad de que cristalización inducida por la deformación pueda ocurrir en esta región.

Cerca del segundo punto de fluencia la cristalinidad tiene un significativo decremento adicional a 31.0% en  $\epsilon=45.8\%$  seguido por un importante incremento significativo a 47.7% en  $\epsilon=56.5\%$ , este último valor de cristalinidad es mayor que el valor inicial de 44.1% en  $\epsilon=0\%$ ; después del segundo punto de fluencia la cristalinidad decreció otra vez. El decremento que aparece antes y cercano a la segunda fluencia ( $\epsilon=47.6\%$ ) puede ser asociado a la fusión parcial de cristales y a la fragmentación lamelar. Esta fragmentación empieza a tener lugar antes de que ocurra el segundo punto de fluencia conduciendo a la transformación del material en una estructura fibrilar [10]. Sin embargo, la única razón para producir el incremento significativo al continuar la deformación es la asociada a un proceso de recristalización. El decremento final para deformaciones más allá del segundo punto de fluencia está relacionado a la observada formación de cuello donde puede ocurrir un aumento de temperatura (referencia 2, capítulo 11); con el incremento de temperatura se espera el decremento de cristalinidad durante la deformación. Los dos rasgos más notables mostrados en la gráfica de la cristalinidad son: 1) el hecho que un decremento significativo ocurra al principio de la segunda zona de fluencia ( $\epsilon > 40\%$ ) el cual, sugerimos, es causado, en parte, por la fusión parcial de los cristales, y 2) el incremento significativo para elongaciones en la región del segundo punto de fluencia, el cual está asociado a un proceso de recristalización. La aparición del segundo punto de fluencia en la Figura 1 está relacionado con el incremento de la cristalinidad observada después de la elongación de 46% en la Figura 2.

Como ya fue mencionado, un proceso de fusión-recristalización fue postulado como una posible explicación para el fenómeno de doble fluencia. La fusión parcial involucra la fusión de cristales menos perfectos. Fue propuesto que durante la deformación la energía para la fusión parcial proviene de la concentración de esfuerzo en estos cristales menos perfectos; de esta manera, no es necesario que un incremento grande de temperatura tenga lugar para que la fusión parcial ocurra [4]. Durante la subsiguiente deformación uniaxial, este material fundido recristalizará, nucleado por remanentes cristales no fundidos y favorecido por la orientación impuesta por las cadenas moleculares; estos cristales no fundidos se hacen más grandes y más perfectos y, por tanto, tienen una mayor temperatura de fusión. Este proceso de cristalización puede verse incrementado por la cristalización de parte del inicial material amorfo cristalizable. Así, con la deformación tensil existe la posibilidad de un nuevo máximo de fluencia basado en los cristales originales y en los recién formados [8]. Algunos autores han citado evidencia para la fusión parcial en la región de fluencia usando microscopía electrónica de transmisión [26], mientras que el proceso de fusión parcial y recristalización en la deformación de polietileno ha sido inferido a partir de experimentos de dispersión de neutrones [27].

Se consideró importante analizar los valores de la cristalinidad en el estado liberado porque permiten examinar las variaciones en la cristalinidad debidas a la exclusiva contribución de la historia impuesta por la deformación plástica. Los resultados obtenidos usando las técnicas de rayos X [16] y de DSC [19] confirman el comportamiento general de los valores de la cristalinidad. Usando la técnica de rayos X se reportó que, en todos los casos, los valores de la cristalinidad para el estado liberado fueron mayores que para el estado tenso; los mecanismos precisos de este comportamiento aun no están bien entendidos, pero pueden estar relacionados a problemas de medir la cristalinidad en muestras orientadas. Sin embargo, puede ser razonable esperar mayores valores de cristalinidad en el estado liberado que en el estado tenso debido a la ausencia de las constricciones impuestas por el esfuerzo sobre las cadenas moleculares.

El decremento significativo observado al inicio de la región de la segunda fluencia, en parte, puede ser

debido al efecto de la fusión, pero el incremento que le sigue es ciertamente debido a la recrystalización. Por otra parte, el incremento observado del esfuerzo que genera la formación del segundo máximo de fluencia pudo ser esperado pues, en general, las propiedades mecánicas de polímeros y, en particular, el esfuerzo a la cedencia para polietileno lineal crece con el grado de cristalinidad [28]. Por tanto, el crecimiento detectado de cristalinidad en la zona de la segunda fluencia debe causar la formación de la segunda fluencia que se ve en la Figura 1.

**Temperatura de fusión.** Todos los especímenes mostraron solamente una temperatura de fusión,  $T_m$ , lo cual significa que los especímenes retuvieron ante la deformación su población lamelar unimodal, aunque el pico de fusión se recorrió a temperaturas menores. Los valores de  $T_m$  para los especímenes deformados a 10 mm/min, en el estado liberado se muestran en la Figura 3. También cambiaron considerablemente con la elongación, como la cristalinidad lo hizo.

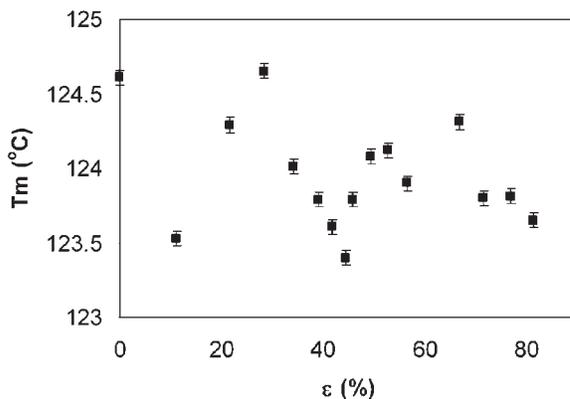


Figura 3. Temperatura de fusión como función de la elongación de los especímenes en la Figura 2.

El valor de  $T_m$  para el espécimen sin deformar fue de 124.6 °C; cercano al primer punto de fluencia se redujo alrededor de 124.3 °C en  $\epsilon=21.6\%$ , después creció a 124.6 °C en una elongación de 28.4% desde donde fue abruptamente reducido a 123.4 °C en  $\epsilon=44.5\%$ . Después de esta reducción el valor de  $T_m$  creció otra vez hasta 124.1 °C en  $\epsilon=52.6\%$ , una elongación cercana al segundo punto de fluencia, y finalmente decreció más allá de la segunda fluencia. Aunque estas variaciones en  $T_m$  son del orden de 1 °C, muestran claramente una evolución en el intervalo de elongación (40-50%) donde ocurrió el segundo punto de fluencia.

Se espera que antes del primer punto de fluencia ( $\epsilon < 20\%$ ) la fracción amorfa haya sido suficientemente estirada de tal manera que las moléculas conectadas se hayan anudado y así ser capaces de transferir el esfuerzo a los cristales. Hasta el primer punto de fluencia el material es elástico y las deformaciones son completamente recuperables. Para explicar la recuperación, este proceso debe ser asociado con la deformación de moléculas no anudadas en la región amorfa [1,13].

El deslizamiento de los bloques cristalinos acompañado con la fragmentación lamelar empieza a tener lugar antes de que ocurra el segundo punto de fluencia conduciendo a una transformación parcial del material en una estructura fibrilar, con formación de cuello [10]. La segunda zona de fluencia ocurre en elongaciones mayores y marca el inicio de la deformación plástica permanente y ha sido asociada con la formación de cuello, destrucción lamelar y el inicio de la transformación morfológica de esferulítica a fibrilar [6-9,13], de esta manera esta fluencia está asociada con un rompimiento más drástico en la estructura del polietileno [6,15].

Estos decrementos en  $T_m$  que ocurren antes del segundo punto de fluencia ( $\epsilon=47.6\%$ ) pueden indicar que las lamelas cristalinas se deforman hasta que fragmentan; los fragmentos forman bloques cristalinos mucho más pequeños. Sin embargo, el decremento de  $T_m$  al inicio de la zona de la segunda fluencia también puede ser adscrito a la fusión parcial y está asociado a la disminución de la cristalinidad. Una inspección detallada de las figuras 2 y 3 muestra que, en la primera mitad del intervalo de elongación 40-50%, los valores tanto de la cristalinidad como de la temperatura de fusión tuvieron el decremento más grande.

Esto puede indicar que la reducción en la temperatura de fusión es producida por fusión parcial o la formación de cristales más pequeños debido a la fragmentación lamelar. También, en la segunda mitad de este intervalo de elongación de 40-50% las cifras muestran incrementos en valores de  $\phi$  y  $T_m$  los cuales están asociados a un proceso de recrystalización. La recrystalización se presenta en los cristales no fundidos produciendo cristales más grandes y, por tanto, valores de  $T_m$  mayores. El decremento subsecuente de los valores de  $T_m$  con la elongación en la zona de la segunda fluencia puede

adscribirse a la fractura de las lamelas cristalinas recién formadas.

Con estos resultados experimentales tanto de la cristalinidad como de la temperatura de fusión se ha podido obtener información sobre la relación entre las propiedades térmicas y el comportamiento mecánico del fenómeno de doble fluencia. Inmediatamente después del primer punto de fluencia ocurre una cristalización de segmentos amorfos inducida por la deformación, mientras que la zona entre los puntos de fluencia está asociada con la fragmentación de lamelas cristalinas. La zona de la segunda fluencia está asociada principalmente con fusión parcial, recristalización y acuellamiento. Esta evidencia experimental indica que el proceso de fusión parcial y recristalización es uno de los mecanismos importantes del fenómeno de doble fluencia y ayuda a explicar la aparición del segundo punto de fluencia.

### Conclusiones

El fenómeno de doble fluencia fue analizado en muestras de polietileno lineal de baja densidad; fueron extruidas a 150 °C y 70 rpm y deformadas uniaxialmente a 10 mm/min en la dirección de extrusión. El análisis térmico de los especímenes liberados, previamente estirados a diferentes niveles de elongación, mostró que el comportamiento de doble fluencia está relacionado con las variaciones del grado de cristalinidad y de la temperatura de fusión. En varias etapas de deformación se activan algunos mecanismos adicionales.

En elongaciones relativamente pequeñas, alrededor del primer punto de fluencia, la cristalinidad decreció debido a la fragmentación de lamelas cristalinas. En la zona entre los dos puntos de fluencia, el incremento de la cristalinidad está asociado con la cristalización inducida por la deformación.

En la zona de la segunda fluencia la cristalinidad otra vez decreció (pronunciadamente) y luego creció pronunciadamente. Este comportamiento está asociado a fusión parcial seguida por recristalización. La temperatura de fusión también decreció y luego creció en el mismo intervalo de elongación. Por tanto, se concluye que estas variaciones son principalmente debidas a la fusión parcial de cristales seguida por recristalización.

Estos resultados muestran que el segundo punto de fluencia no solamente está asociado con la deformación de la porción cristalina, también está asociado con un proceso de fusión parcial de los cristales seguida de una recristalización.

### Referencias

- [1]. O'Connell, P.A.; McKenna, G.B. Yield and crazing in polymers. In *Encyclopedia of Polymer Science and Technology*, John Wiley & Sons, 2004. Article Online.
- [2]. Ward, I. M. *Mechanical Properties of Solid Polymers*, 2nd ed.; Wiley: New York, 1990.
- [3]. Schultz, J. *Polymer Materials Science*; Prentice-Hall: Englewood Cliffs, 1974.
- [4]. Popli, R.; Mandelkern, L. Influence of structural and morphological factors on the mechanical properties of the polyethylenes. *J. Polym. Sci., Pt B, Polym. Phys.* 1987, 25, 441.
- [5]. Seguela, R.; Rietsch, F. Double yield point in polyethylene under loading. *J. Mater. Sci. Lett.* 1990, 9, 46.
- [6]. Brooks, N. W.; Duckett, R. A.; Ward, I. M. Investigation into double yield points in polyethylene. *Polymer* 1992, 33, 1872.
- [7]. Séguéla, R., Darras, O. Phenomenological aspects of the double yield of polyethylene and related copolymers under tensile loading. *J. Mater. Sci.* 1994, 29, 5342.
- [8]. Lucas, J. C.; Failla, M. D.; Smith, F. L.; Mandelkern, L.; Peacock, A. J. The double yield in the tensile deformation of the polyethylenes. *Polym. Eng. Sci.* 1995, 35, 1117.
- [9]. Feijoo, J. L.; Sanchez, J. J.; Muller, A. J. The phenomenon of double yielding in blown polyethylene films. *Polym. Bull.* 1997, 39, 125.
- [10]. Gaucher-Miri, V.; Séguéla, R. Tensile yield of polyethylene and related copolymers: mechanical and structural evidences of two thermally activated processes. *Macromolecules* 1997, 30, 1158.

- [11]. Schrauwen, B. A. G.; Janssen, R. P. M.; Govaert, L. E.; Maijer, H. E. H. Intrinsic deformation behavior of semicrystalline polymers. *Macromolecules* 2004, 37, 6069.
- [12]. Balsamo, V.; Müller, A. J. The phenomenon of double yielding under tension in low-density polyethylene, linear low-density polyethylene and their blends. *J. Mater. Sci. Lett.* 1993, 12, 1457.
- [13]. Brooks, N. W. J.; Unwin, A. P.; Duckett, R. A.; Ward, I. M. Double yield points in polyethylene: structural changes under tensile deformation. *J. Macromol. Sci.-Phys.* 1995, B34, 29.
- [14]. Brooks, N. W.; Unwin, A. P.; Duckett, R. A.; Ward, I. M. Temperature and strain rate dependence of yield strain and deformation behavior in polyethylene. *J. Polym. Sci. B: Polym. Phys.* 1997, 35, 545.
- [15]. Butler, M. F.; Donald, A. M.; Ryan, A. J. Time resolved simultaneous small- and wide-angle X-ray scattering during polyethylene deformation: 1. Cold drawing of ethylene- $\alpha$ -olefin copolymers. *Polymer* 1997, 38, 5521.
- [16]. Manzur, A.; Rivas, J. I. Crystallinity variations in the double yield region of polyethylene. *J. Appl. Polym. Sci.* 2007, 104, 3103.
- [17]. Manzur, A. Strain rate effect on crystallinity variations in the double yield region of polyethylene. *J. Appl. Polym. Sci.* 2008, 108, 1574.
- [18]. Shan, G. F., Yang, W., Yang, M. B., Xie, B. H., Fu, Q., Mai, Y. W. Investigation on tensile deformation behavior of semi-crystalline polymers. *J. Macromol. Sci. Part B-Phys.* 2009, 48, 799.
- [19]. Manzur, A. Evolution of thermal properties of polyethylene in the double yield region after uniaxial deformation. *J. Macromol. Sci. part B: Physics*, 2012, 51, 400.
- [20]. Spathis, G.; Kontou, E. Nonlinear viscoelastic model for the prediction of double yielding in a linear low-density polyethylene film. *J. Appl. Polym. Sci.* 2004, 91, 3519.
- [21]. Adhikari, R.; Buschnakowski, M.; Henning, S.; Goerlitz, S.; Huy, T. A.; Lebek, W.; Godehardt, R.; Michler, G. H.; Lach, R.; Geiger, K.; Knoll, K. Double yielding in a styrene/butadiene star block copolymer. *Macromol. Rapid Commun.* 2004, 25, 653.
- [22]. Li, Z-M.; Huang, C-G.; Yang, W.; Yang, M-B.; Huang, R. Morphology dependent double yielding in injection molded polycarbonate/polyethylene blend. *Macromol. Mater. Eng.* 2004, 289, 1004.
- [23]. Yamada, K.; Takayanagi, M. Superstructural description of deformation process in uniaxial extension of preoriented isotactic polypropylene. *J. Appl. Polym. Sci.* 1979, 24, 781.
- [24]. Scogna, R. C., Register, R. A. Plastic deformation of ethylene/methacrylic acid copolymers and ionomers. *J. Polym. Sci. Part B: Polym. Phys.* 2009, 47, 1588.
- [25]. Wunderlich, B. *Macromolecular Physics*; Academic Press: New York, 1973; Vol. 1.
- [26]. Phillips, P. J.; Philpot, R. J. Direct evidence for melting during drawing of polyethylene. *Polym. Comm.* 1986, 27, 307.
- [27]. Wignall, G. D.; Wu, W. A SANS investigation into the role of melting and recrystallization during solid state deformation of polyethylene. *Polym. Comm.* 1983, 24, 354.
- [28]. Kennedy, M. A.; Peacock, A. J.; Mandelkern, L. Tensile properties of crystalline polymers: linear polyethylene. *Macromolecules* 1994, 27, 5297.

# **Medida, Dimensión y Fractales**



**José Luis Del Río-Correa.**  
**Departamento de Física, UAM-Iztapalapa**

**Resumen.**

Se hace una presentación pedagógica de la dimensión de Hausdorff, resaltando la forma en que Mandelbrot llevo este concepto altamente especializado a las ciencias naturales, en donde genéricamente es llamada la dimensión fractal. También se discuten algunas aplicaciones recientes como el uso de antenas fractales que son mas eficientes y versátiles que las habituales, estas antenas son utilizadas en telefonía celular y telecomunicaciones, todo ello provocado por los descubrimientos de Nathan Cohen.

**Introducción.**

El objetivo de este trabajo es hacer una presentación pedagógica de lo que entendemos por objetos fractales, este término fue acuñado por Benoit Mandelbrot en su artículo de titulado: ¿Qué tan grandes son las costas de Bretaña? publicado en la revista Science en 1967.[1]

Empezaremos por los estudios de Lewis Fry Richardson [2]) sobre la longitud de costas, que llevan a la conclusión de que en general la longitud  $L$  es una cantidad que depende de la escala  $\varepsilon$  que se use para medir, obteniendo experimentalmente una ley de potencias cuyo exponente caracteriza a una costa dada. Este es el exponente de Richardson de la costa en cuestión.

Por otra parte se presentan la teoría matemática de Felix Hausdorff [3, 4] que utilizando cubiertas define la medida de un objeto en una dimensión arbitraria, siendo esta medida casi siempre cero ó infinito, sin embargo existe un solo valor de la dimensión para la cual la medida es finita y distinta de cero, que es la dimensión de Hausdorff del objeto.

A primera vista los estudios de Richardson y los de Hausdorff no tienen nada en común, sin embargo Mandelbrot conjugó ambos resultados, mostrando que el exponente de Richardson y la dimensión de Hausdorff son prácticamente los mismos, el primero proveniente de un estudio experimental y el segundo de una teoría matemática abstracta. Usando esta identificación Mandelbrot define las curvas fractales y combinando las ideas de

Richardson con las de Hausdorff muestra como obtener la dimensión fractal de un objeto.

Mandelbrot encontró expresiones analíticas para la dimensión de Hausdorff de objetos que presentan la propiedad de auto-similaridad. Mostraremos que esta propiedad implica que el número mínimo de bolas cerradas de diámetro menor o igual que  $\varepsilon$  necesarias para cubrir un conjunto autosimilar  $F$ ,  $N_F(\varepsilon)$  satisface ecuaciones funcionales, cuya solución nos permite encontrar la dimensión de Hausdorff de estos conjuntos.

Mandelbrot presentó su trabajo sobre objetos fractales en una forma extensa en su libro *The Fractal Geometry of Nature* [5] actualmente considerado como un clásico, ya que cambio por completo nuestra visión de la naturaleza, en donde ahora se consideran muy importantes los fenómenos no-lineales, que generan objetos fractales relacionados con el caos determinista.

**Richardson y la longitud de las costas.**

En 1961 el físico L. F. Richardson fue comisionado para determinar la longitud de la costa oeste de Inglaterra, para ello tomo un mapa a una escala dada, y procedió a utilizar el método de Arquímedes que consiste en aproximar la costa por una poligonal, con lados iguales de longitud  $\varepsilon_1$ , contar el número de lados de la poligonal  $N(\varepsilon_1)$  y encontrar la longitud de la costa para la escala  $\varepsilon_1$ :

$$L(\varepsilon_1) = N(\varepsilon_1)\varepsilon_1 \quad (1)$$

Claramente esta cantidad es solo una estimación de la longitud de la costa, para obtener una mejor estimación construyó una nueva poligonal cuya longitud de sus lados es  $\varepsilon_2 < \varepsilon_1$ , evaluó  $N(\varepsilon_2)$  y calculó  $L(\varepsilon_2)$ , repitiendo este proceso para poligonales con una longitud de sus lados cada vez menor, obtuvo una secuencia de longitudes  $\{L(\varepsilon_1), L(\varepsilon_2), \dots, L(\varepsilon_n)\}$  con  $\varepsilon_n < \varepsilon_{n-1} < \dots < \varepsilon_2 < \varepsilon_1$ .

En la figura 1 se muestran los resultados que se obtienen para la longitud de la costa cuando se utilizan poligonales con lados cada vez más pequeños.

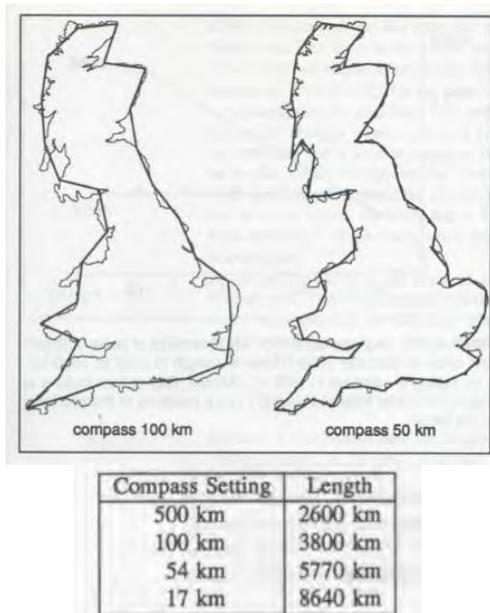


Figura 1. Método de Arquímedes para medir la longitud de las costas de Inglaterra.

El resultado que Richardson esperaba era que la secuencia de longitudes medidas con poligonales de lado cada vez más pequeño tendiera a un valor límite, el cual sería la longitud de la costa, v.gr.

$$L = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} N(\varepsilon)\varepsilon \quad (2)$$

Sin embargo, cuando Richardson llevó a cabo este proceso para medir la longitud de la costa oeste de Inglaterra, encontró que cada vez que reducía la escala de medición la longitud aumenta, esto es para  $\varepsilon_n < \varepsilon_{n-1}$  obtuvo que  $L(\varepsilon_n) > L(\varepsilon_{n-1})$ , de manera que la secuencia de longitudes NO converge a un valor finito, sino que diverge a infinito:

$$L = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} N(\varepsilon)\varepsilon = \infty \quad (3)$$

Llegando a la conclusión de que la longitud de la costa de Inglaterra es infinita, y por lo tanto no es posible comparar diferentes regiones de la costa, para saber cual es la más grande, ya que ambas tienen una longitud infinita.

Ante este resultado inesperado, Richardson se dio cuenta que la longitud de la costa depende del valor de la escala utilizada para construir la poligonal, y procedió a buscar la forma explícita de

esta dependencia, para ello graficó en una escala doblemente logarítmica  $L(\varepsilon_n)$  contra  $\varepsilon_n$ , encontrando que los datos se ajustaban bastante bien por mínimos cuadrados a una recta de pendiente negativa:

$$\ln L(\varepsilon) = -|m| \ln \varepsilon + \ln b \quad (4)$$

este resultado implica que la longitud satisface la siguiente ley de potencias:

$$L(\varepsilon) = b\varepsilon^{-|m|} \quad (5)$$

utilizando este resultado se pueden comparar, para un valor dado de  $\varepsilon$ , dos partes de la costa aun cuando la longitud de cada una sea infinita, ya que al aproximar cada una de esta partes por una poligonal de lado  $\varepsilon$ , se satisface que:

$$L_1(\varepsilon) = b_1\varepsilon^{-|m|}; \quad L_2(\varepsilon) = b_2\varepsilon^{-|m|} \quad (6)$$

Por lo que la razón  $\frac{L_2(\varepsilon)}{L_1(\varepsilon)} = \frac{b_2}{b_1}$  no depende de la

longitud  $\varepsilon$  de la poligonal utilizada. Por lo tanto la extensión de ciertas partes de la costa pueden ser comparadas, no por sus longitudes sino por sus coeficientes  $b$ . Así, encontró que la forma de medir la extensión de la costa por el método de Arquímedes, que se utiliza para curvas lisas, es inaplicable, para medir las costas de Inglaterra.

A continuación Richardson investigó en enciclopedias y almanaques la longitud de la fronteras terrestres entre diferentes países. Para la frontera entre España y Portugal las fuentes españolas reportaban una longitud máxima de 987 Km. en tanto que las portuguesas reportaban 1214 Km., para la frontera entre Holanda y Bélgica, los primeros reportaban 380 Km. contra 449 Km. La forma en que Richardson explicó estos resultados es que los países limítrofes habían medido con diferentes escalas la longitud de sus fronteras, como se sigue del siguiente razonamiento:

- a) De los diferentes datos encontró que la pendiente de la recta en la gráfica log-log para la frontera España y Portugal era de  $-1/3$  en tanto que la de Bélgica y Holanda era de  $-1/4$ .

b) Como la grafica log-log es una recta de pendiente  $m$ , se tiene que  $L(\epsilon) = b\epsilon^{-|m|}$ , de donde al medir la longitud con dos escalas diferentes tenemos la siguiente relación:

$$\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} = \left( \frac{L(\epsilon_1)}{L(\epsilon_2)} \right)^{\frac{1}{|m|}} \quad (7)$$

de donde se encuentra que la escalas usadas por los países limítrofes están relacionadas de la siguiente manera:

$$\epsilon_{\text{España}} = 1.86 \epsilon_{\text{Port.}}; \quad \epsilon_{\text{Holanda}} = 1.94 \epsilon_{\text{Bélgica.}}$$

La figura 2 muestra las diferentes medidas experimentales de Richardson de longitudes de varias curvas usando poligonales de lado  $\epsilon$  cada vez más pequeño.

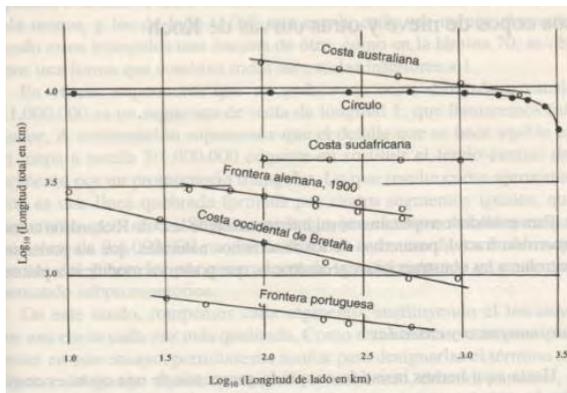


Figura 2. Resultados de Richardson.

### Medida y Dimensión de Hausdorff.

En 1919 Felix Hausdorff introdujo la noción de la medida de un conjunto *en todas las dimensiones posibles*.

Se define la medida de un conjunto  $M$ , como un número asociado a tal conjunto, y es denotado genéricamente por  $\mu(M)$ . Claramente existe muchos tipos de medidas, la que aquí nos ocupará será la medida de Hausdorff de  $M$  en dimensión  $\alpha$ :  $H_\alpha(M)$ .

$H_\alpha(M)$  esta asociada con  $N(\epsilon)$ , el número mínimo de esferas de diámetro  $\epsilon$  que adoquinan al conjunto  $M$ , y la dimensión  $\alpha$  entra al considerar el producto  $N(\epsilon)\epsilon^\alpha$ , así se define  $H_\alpha(M)$  por el siguiente límite:

$$H_\alpha(M) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} N(\epsilon) \epsilon^\alpha \quad (8)$$

Ejemplos simples de medidas de Hausdorff en dimensiones enteras son los siguientes:

La medida de Hausdorff en dimensión 1 de una curva acotada es la longitud de la curva, ya que  $N(\epsilon)$  es el número de lados de la poligonal, y  $\epsilon$  es la longitud del lado.

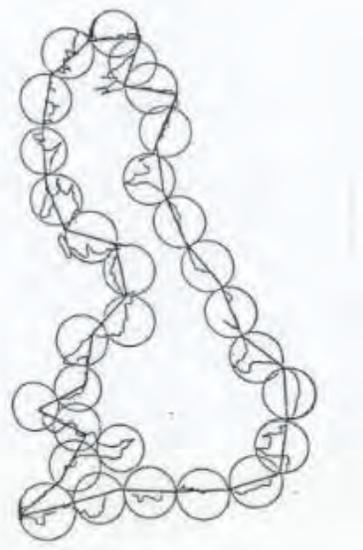


Figura 3.  $H_1(\text{Costas de Inglaterra}) = N(\epsilon)\epsilon$

Cuando  $M$  es una región acotada en un plano,  $H_2(M)$  es el área de esta región, en tanto que si  $M$  denota una región acotada en el espacio  $H_3(M)$  es el volumen de esa región.

Para objetos unidimensionales como una línea ó bien el intervalo unitario, el número  $N(\epsilon)\epsilon=L$ , nos da la longitud del intervalo de manera que para objetos unidimensionales tenemos que  $N(\epsilon)=L\epsilon^{-1}$ . Cuando se trata de una superficie, que es adoquinada con  $N(\epsilon)$  cuadrados de arista  $\epsilon$ , el área esta dada por  $A=N(\epsilon)\epsilon^2$ , por lo que para objetos bidimensionales  $N(\epsilon)=A\epsilon^{-2}$ , para medir el volumen de un objeto, lo llenamos con  $N(\epsilon)$  cubos de arista  $\epsilon$ , y su volumen esta dado por  $V=N(\epsilon)\epsilon^3$ , de forma que para objetos tridimensionales  $N(\epsilon)=V\epsilon^{-3}$ . Vemos que para estos casos familiares  $N(\epsilon)$  aumenta cuando  $\epsilon$  disminuye y satisface una ley de potencias donde el exponente es la dimensión del

objeto, generalizando estos resultados esperamos que  $N(\varepsilon)$  se comporte para valores pequeños de  $\varepsilon$  siguiendo una ley de potencias de la forma:

$$N(\varepsilon) = A \left( \frac{1}{\varepsilon} \right)^D \quad (9)$$

en donde el exponente  $D$  es una cantidad característica del conjunto  $M$ , de manera que:

$$H_\alpha(M) = A \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon^{\alpha-D} = \begin{cases} 0 & \text{si } \alpha > D \\ A & \text{si } \alpha = D \\ \infty & \text{si } \alpha < D \end{cases} \quad (10)$$

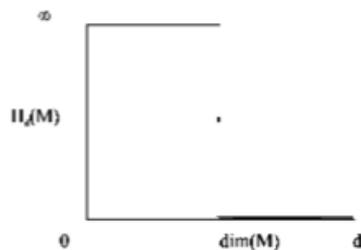


Figura 4. Gráfica de las medidas de Hausdorff de un objeto para toda dimensión.

el hecho de que  $N(\varepsilon)$  satisfaga una ley de potencias, implica que las medidas de Hausdorff para casi todas las dimensiones toman el valor cero ó el valor infinito, en cuyo caso se dice que la medida de Hausdorff del objeto en esa dimensión es degenerado, y solamente existe una dimensión característica del conjunto  $M$  para la cual la medida de Hausdorff proporciona un valor diferente. Este valor define la dimensión de Hausdorff de  $M$ . Notemos que  $H_\alpha(M)$  es nula para dimensiones mayores que la dimensión de Hausdorff  $D$  y es infinita para dimensiones menores que  $D$ .

### Mandelbrot y la Dimensión fractal.

Los resultados de Richardson y de Hausdorff aparecen en áreas del conocimiento muy distintas, el primero es un estudio muy aplicado y el segundo se desarrolla en el campo de la matemática abstracta, y se necesitaba de alguien muy especial para establecer una relación entre ambos trabajos. Esta persona fue Benoit Mandelbrot, quien encuentra la conexión entre ellos en 1967 y establece por primera vez que en la naturaleza no solamente las costas presentan un comportamiento

“anómalo” sino que este comportamiento es el habitual en la naturaleza, que sin saber nada de matemáticas utiliza en forma extensiva las ideas abstractas de Hausdorff.

Notemos que lo que ambos trabajos tienen en común es que aparecen leyes de potencias, en el primer caso asociados con la dependencia de la longitud con respecto a la escala (véase ec. (5)) y en el caso de Hausdorff en la ley de potencias que gobierna el número mínimo de esferas que se requieren para adoquinar eficientemente un conjunto (véase la ec. (9)), y en segundo lugar que la longitud es la medida de Hausdorff en dimensión 1 (véase las ecs (2) y (8)). Esto nos permite establecer una conexión entre la pendiente de la recta en las gráficas log-log de Richardson y la dimensión de Hausdorff, de las ecs. (1) y (5) tenemos :

$$N(\varepsilon) = \frac{L(\varepsilon)}{\varepsilon} = b\varepsilon^{-1-|m|} \quad (11)$$

Identificando el número de lados de la poligonal con el número óptimo de esferas de diámetro que cubren la costa, tenemos de la ec. (9) y (11):  $b\varepsilon^{-1-|m|} = A\varepsilon^{-D}$ , de donde encontramos que la dimensión de Hausdorff de las costas es:

$$D = 1 + |m| \quad (12)$$

y como  $A = b$ , la medida de las costas en dimensión  $D$  es igual a la intersección de la recta con el eje de las ordenadas. La ec. (10) implica que como las costas tienen una dimensión de Hausdorff mayor que 1, su longitud (la medida de Hausdorff en dimensión 1) es infinita. Por una parte las ideas de Hausdorff permiten entender los resultados aparentemente paradójicos de Richardson, y por otra parte el trabajo de Richardson nos permite encontrar un algoritmo para encontrar la dimensión de Hausdorff de un objeto.

### Algoritmo de Richardson para encontrar la dimensión de Hausdorff y su medida.

La cubierta del objeto puede ser con esferas o con cuadrados, en el caso de objetos en un plano es más simple cubrirlo con cuadrados ó con píxeles.

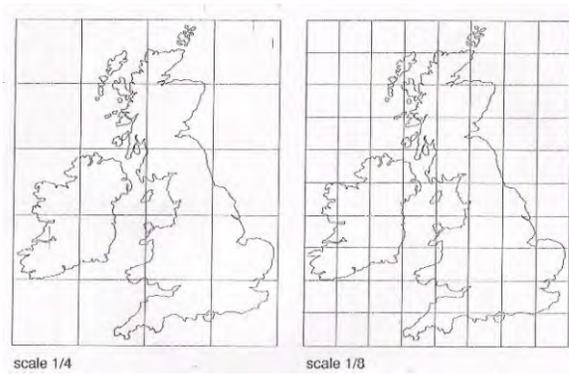


Figura 5. Mapa de Inglaterra dentro de cuadrículas de escalas 1/4 y 1/8.

Consideremos el problema original de Richardson, que consiste en medir la longitud de las costas de Bretaña. Para lo que utilizamos un mapa de Inglaterra y una cuadrícula de lado  $\epsilon_1$ , contamos el número  $N(\epsilon_1)$  de cuadrados que se requieren para cubrir la costa de Bretaña, a continuación se construye una cuadrícula mas fina de lado  $\epsilon_2$  contando el número  $N(\epsilon_2)$  de cuadrados que adoquinan la costa, repitiendo este proceso para cuadrículas cada vez más finas se encuentra un arreglo de la forma:

$$\begin{pmatrix} \epsilon_1 & \epsilon_2 & \dots & \epsilon_q \\ N(\epsilon_1) & N(\epsilon_2) & \dots & N(\epsilon_q) \end{pmatrix} \quad (13)$$

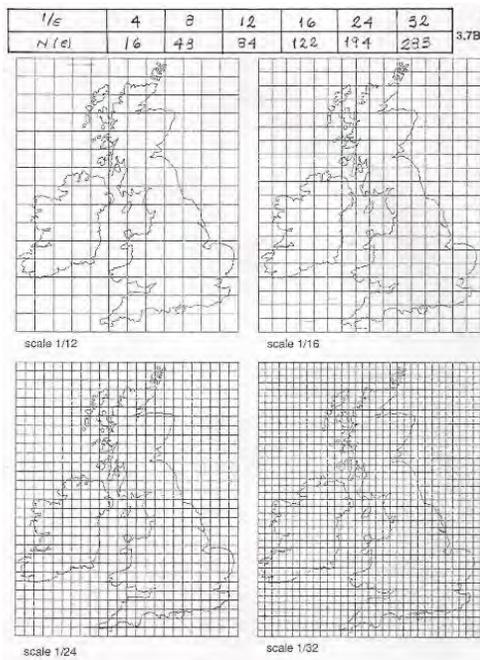


Figura 6. Mapa de Inglaterra dentro de cuadrículas de escalas 1/12 a 1/32, y el número de cuadrados que se requieren para adoquinar las costas de Inglaterra.

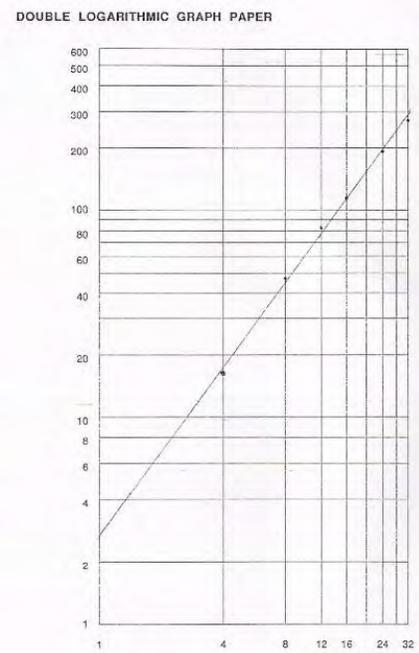


Figura 7. Grafica log-log de los resultados encontrados en las figuras 5 y 6.

Se grafican los puntos de coordenadas  $(-\ln \epsilon_r, \ln N(\epsilon_r))$ . A estos puntos se le ajusta una recta utilizando mínimos cuadrados. La pendiente de la recta es entonces la dimensión de Hausdorff y su ordenada al origen es  $H_D(M)$ .

Claramente este algoritmo puede implementarse fácilmente utilizando imágenes de una costa tomadas por satélite y variando el tamaño de los pixeles que cubre la región bajo estudio.

**Dimension fractal de objetos autosimilares**



Figura 8. Coliflor mostrando la característica de conjunto autosimilar en diferentes escalas.

En general no se tiene una expresión sencilla para calcular la dimensión de Hausdorff de un conjunto dado, y normalmente tiene que hacerse en forma numérica, sin embargo existen ciertos conjuntos para los cuales es posible encontrar expresiones cerradas que permitan calcular su dimensión. Estos son objetos que presentan la propiedad de autosimilaridad, que significa que son conjuntos que están formados por copias reducidas del mismo objeto, un ejemplo simple son las coliflores, como se muestra en la fig. 8. Para definir matemáticamente estos objetos empezaremos por definir una transformación de similitud.

En el espacio euclideo  $\mathbb{R}^n$ , un real  $r$  positivo determina una transformación de similitud cuando un punto  $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ , se transforma como  $r(\vec{x}) = (rx_1, rx_2, \dots, rx_n) \in \mathbb{R}^n$ .

Lo anterior es simplemente tomar el vector de posición de un punto y cambiar su magnitud por un factor  $r$ . Cuando aplicamos esta transformación a un conjunto  $F$  de puntos, si  $r > 1$  se obtiene una copia amplificada de  $F$  en tanto que para  $r < 1$  se obtiene una copia reducida del conjunto, para definir los objetos autosimilares estaremos interesados en casos en que  $r$  sea menos que 1. Así esta transformación aplicada a un subconjunto  $F$  de  $\mathbb{R}^n$  define a un nuevo conjunto  $r(F)$  como:

$$r(F) = \{r(\vec{x}) : \vec{x} \in F\}$$

Esta transformación corresponde a aplicar una matriz diagonal con elemento  $r$  a todos los puntos de  $F$ .

Otro concepto que usaremos para definir la autosimilaridad es el de congruencia entre dos conjuntos, diremos que dos conjuntos  $F$  y  $G$  en  $\mathbb{R}^n$  son congruentes, si son idénticos excepto por desplazamiento y rotaciones, denotándose la congruencia por  $F \sim G$ . Esto significa que si desplazamos a  $F$  y luego lo rotamos (incluyendo las rotaciones impropias, que corresponden a inversiones ó reflexiones) todos los puntos de  $F$  coinciden con los de  $G$ .

Diremos que un conjunto  $F$  es autosimilar en las razones  $\{r_1, r_2, \dots, r_q\}$ , cuando  $F$  esta formado por copias idénticas a él pero cada copia esta escalada, siendo  $\{r_1, r_2, \dots, r_q\}$  los factores de escala, en símbolos tenemos:

$$F = \bigcup_{i=1}^q F_i \text{ donde } F_i \sim r_i(F) \text{ y además } F_i \cap F_j = \emptyset \quad (14)$$

El caso más sencillo de conjunto autosimilar es cuando todas las razones son iguales, o sea  $r_1 = r_2 = \dots = r_q = r$ , en cuyo caso se dice que  $F$  es autosimilar con respecto a la razón  $r$  y a un entero  $q$ .

Para ejemplificar este concepto, en la figura 9 se muestra el triángulo de Sierpinski, que esta conformado por tres copias reducidas por un factor de un medio.

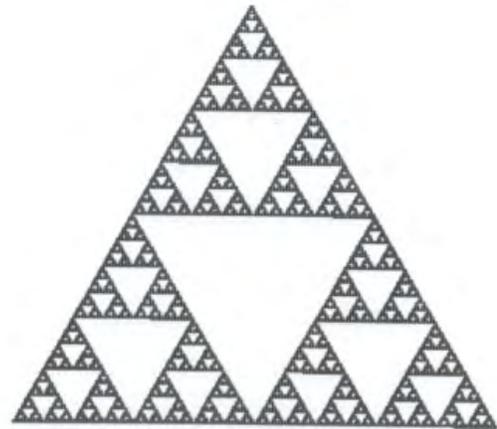


Figura 9. Triángulo de Sierpinski.

Para calcular la dimensión de Hausdorff de conjuntos autosimilares con una sola razón, necesitamos encontrar la ley de potencias que satisface el número  $N_F(\epsilon)$  de esferas de diámetro  $\epsilon$  necesarias para cubrir  $F$ , y utilizar la ec.(9) para evaluar la dimensión de Hausdorff. Para resolver este problema haremos uso de análisis funcional.

Supongamos que podemos adoquinar a  $F$  con  $N_F(\epsilon)$  esferas de diámetro  $\epsilon$ , conociendo que  $F$  es autosimilar en una razón  $r$  y un entero  $q$ , nos preguntamos cuantas esferas de diámetro  $r\epsilon$  necesitamos para adoquinar a  $F$ .

Hagamos una reducción en un factor  $r$  de  $F$  incluyendo a su cubierta de esferas de diámetro  $\varepsilon$ , así obtenemos una copia reducida  $r(F)$ , cubierta por  $N_F(\varepsilon)$  esferas de diámetro  $r\varepsilon$ , por autosimilaridad requerimos de  $q$  copias reducidas  $r(F)$  para conformar al conjunto  $F$ , de manera que el número de esferas de diámetro  $r\varepsilon$  necesarias para cubrir  $F$  esta dado por:

$$N_F(r\varepsilon) = qN_F(\varepsilon) \quad (15)$$

que es una ecuación funcional cuya solución es (ver Apéndice):

$$N_F(\varepsilon) = A\varepsilon^\alpha \quad \text{con} \quad \alpha = \frac{\ln q}{\ln r} \quad (16)$$

al comparar este resultado con la ec. (9), encontramos que la dimensión de Hausdorff de un conjunto autosimilar en la razón  $r$  y el entero  $q$  esta dada por:

$$D = -\frac{\ln q}{\ln r} \quad (17)$$

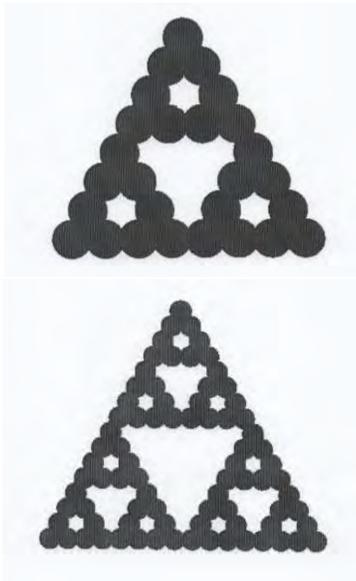


Figura 10. La cubierta de abajo esta formada por tres copias reducidas por un factor de  $\frac{1}{2}$  de la cubierta de arriba.

Calcularemos ahora la dimensión de Hausdorff de un conjunto autosimilar conformado por la unión de  $q$  reducciones de  $F: \{F_1, F_2, \dots, F_q\}$  con las

razones  $\{r_1, r_2, \dots, r_q\}$ , de manera que  $F_k = r_k(F)$ , Supondremos ahora que  $F_k$  es cubierto por  $N_{F_k}(\varepsilon)$  esferas de diámetro  $\varepsilon$  si agrandamos este conjunto con su cubierta por un factor  $\frac{1}{r_k}$  vemos que  $F$  es cubierto por esferas de diámetro  $\frac{\varepsilon}{r_k}$ , de manera que:

$$N_{F_k}\left(\frac{\varepsilon}{r_k}\right) = N_F\left(\frac{\varepsilon}{r_k}\right) \quad \text{como} \quad N_F(\varepsilon) = \sum_{k=1}^q N_{F_k}(\varepsilon),$$

obtenemos la ecuación funcional:

$$N_F(\varepsilon) = \sum_{k=1}^q N_F\left(\frac{\varepsilon}{r_k}\right) \quad (18)$$

La dimensión de Hausdorff se encuentra al proponer la ec.(9) como solución de la ecuación funcional anterior, así al substituir la ec.(9) en la ec.(17), se tiene:

$$A\varepsilon^{-D} = A\varepsilon^{-D} \sum_{k=1}^q r_k^D \quad (19)$$

por lo que la dimensión de Hausdorff es la solución de la ecuación:

$$\sum_{k=1}^q r_k^D = 1 \quad (20)$$

Aplicando este resultado en caso particular en que todas las razones sean iguales:  $r_1 = r_2 = \dots = r_q = r$ , entonces tenemos que (19) toma la forma:  $qr^D = 1$ , de donde se obtiene de inmediato la ec.(17). Estos resultados muestran que cuando el objeto es autosimilar, entonces  $N_F(\varepsilon)$  satisface ecuaciones funcionales relativamente simples, cuya solución es una ley de potencias que determina la dimensión de Hausdorff de objetos autosimilares.

### Mandelbrot y las curvas Monstruosas.

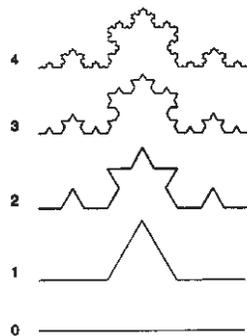
Terágono es una palabra acuñada por Mandelbrot que viene del griego “teras” que significa monstruo, criatura extraña y de “gonia” que significa esquina, ángulo, de forma que los terágonos son curvas monstruosas con muchas esquinas. Lo monstruoso de ellas consiste en que son curvas continuas que no son derivables en ningún punto, las cuales se pensaba que eran de muy difícil construcción, sin embargo Mandelbrot en su libro[5] enseña como utilizando un proceso iterativo es posible construir estas curvas y además que cuando el número de lados de estas curvas tiende a infinito se obtienen fractales autosimilares.

Los terágonos son construidos utilizando un iniciador y un proceso de cascada. Para familiarizarnos con el proceso consideremos la construcción de la curva de Koch.

El iniciador consiste en tomar un segmento de línea dividirlo en tres partes iguales, reemplazar al segmento medio por dos segmentos iguales formando parte de un triángulo equilátero.

La cascada consiste en aplicar el generador sobre cada uno de los segmentos, así a cada segmento se le reemplaza por cuatro segmentos de longitud  $1/3$  de su antecesor. Este proceso se repite una y otra vez, dando lugar a la curva de Koch.

En la figura 11 se muestran los primeros pasos para obtener la curva de Koch, en donde la figura 1 es el iniciador y las figuras siguientes corresponden al proceso de cascada. La curva de Koch es el límite al que tiende la figura cuando iteramos un número infinito de veces.



Construcción de la curva de Koch

Figura 11. Iniciador y tres procesos de cascada que generan la curva de Koch.

Analizaremos ahora las diferentes características que llevaron a considerar monstruosa a esta curva. La longitud de la curva aumenta en cada paso de la construcción por un factor  $4/3$ , de manera que denotando por  $L(\varepsilon)$  la longitud de la curva cuando cada lado del teragono es igual a  $\varepsilon$ , en el siguiente paso la longitud del teragono será  $\varepsilon/3$  y la longitud total será  $4 L(\varepsilon)/3$ , así:

$$L\left(\frac{\varepsilon}{3}\right) = \frac{4}{3} L(\varepsilon)$$

la solución de esta ecuación funcional es

$$L(\varepsilon) = A\varepsilon^\alpha \quad \text{con} \quad \alpha = 1 - \frac{\ln 4}{\ln 3} < 0$$

La longitud de la curva de Koch se encuentra cuando se toma el límite cuando  $\varepsilon \rightarrow 0$ , como  $\alpha$  es negativo se encuentra que  $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} L(\varepsilon) = \infty$ , así esta curva tiene una longitud infinita.

Mandelbrot hace notar que la longitud del teragono satisface una ley de potencias idéntica con la longitud de las costas de Richardson, por lo que la curva de Koch es un modelo muy simple para las costas, de hecho es posible formar una modelo de juguete para una isla, cuando se aplica mismo iniciador a un triángulo equilátero y aplicando el proceso de cascada a cada lado del triángulo se encuentra un objeto que tiene una área finita pero con un perímetro infinito.

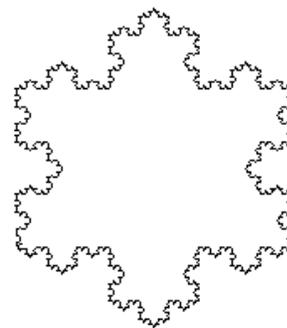


Figura 12. Modelo de una isla, utilizando la curva de Koch.

Con respecto a los puntos en que los terágonos no tienen derivada, observamos que en la  $n$ -ésima iteración su número es  $4^n - 1$ , y como la curva de Koch se obtiene en el proceso límite cuando  $n \rightarrow \infty$ , encontramos que la curva de Koch tiene un número infinito de puntos singulares.

También observamos que la curva de Koch es autosimilar ya que esta formada por cuatro copias idénticas a ella pero reducidas por una razón  $1/3$ , de manera que su dimensión de Hausdorff es  $D = \ln 4 / \ln 3$ .

Debido a todas estas extrañas propiedades de la curva de Koch se le catalogaba como una curva monstruosa, pero Mandelbrot nos hace ver que la naturaleza elige precisamente la geometría de las curvas monstruosas.

En general, los terágonos son construidos utilizando un iniciador y un proceso de cascada. El iniciador consiste en sustituir un segmento de línea recta que une los puntos A y B, por una línea quebrada formada por  $\eta$  líneas de igual longitud que una los puntos A y B. La cascada consiste en repetir el mismo proceso sobre cada una de las líneas que conforman la línea quebrada, y a la figura resultante repetirle en proceso, generando un proceso iterativo.

El proceso anterior lo podemos expresar diciendo que cuando el terágono esta formado por una poligonal de  $N(\varepsilon)$  lados cada uno con una longitud  $\varepsilon$ , al aplicar el generador a cada lado de la poligonal se obtiene una nueva poligonal con un número de lados  $\eta N(\varepsilon)$  y la longitud de cada lado es  $r\varepsilon$ , de manera que  $N(r\varepsilon) = \eta N(\varepsilon)$ , que es la relación que satisfacen los objetos autosimilares, de manera que la construcción de terágonos con las reglas de Mandelbrot nos permite construir fractales autosimilares.

La dimensión fractal de los objetos autosimilares construidos con las reglas de Mandelbrot, se encuentra directamente del generador del terágono, al contar  $N$  el número de lados que tiene la línea quebrada, y dar el factor de reducción  $r$  que se

aplica a la longitud del segmento AB, para obtener la longitud de uno de los lados del teragono, i.e.

$$D = -\frac{\ln N}{\ln r}$$

### **Antenas Fractales, teléfonos celulares y el hombre invisible.**

Con objeto de que el lector tenga idea de la importancia de los fractales en nuestra vida cotidiana a reproduzco continuación parte de un artículo de Wikipedia [6].

*“ Los elementos de antenas construidos con curvas autosimilares fueron creados en 1988 por Nathan Cohen, de la Universidad de Boston. Los diseños de Cohen para una gran variedad de antenas fractales fueron publicados en 1995 [7], siendo esta la primera publicación científica sobre antenas fractales, que dio lugar a una gran cantidad de patentes de Cohen para garantizar la prioridad de su invención. La mayoría de los trabajos sobre antenas fractales hacen referencia a estas patentes. Muchos elementos de las antenas fractales utilizan la estructura fractal como una combinación virtual de condensadores y bobinas. Esto hace que la antena posea muchas resonancias diferentes que pueden escogerse y ajustarse seleccionando el diseño fractal adecuado. Su complejidad aparece porque la corriente sobre la estructura fractal tiene un arreglo complejo causado por la inductancia y la auto-capacitancia. En general aunque la longitud eléctrica efectiva es muy grande, las antenas con elementos fractales son físicamente pequeñas.*

*Los elementos fractales de las antenas son de tamaño muy pequeño comparadas con las de diseño tradicional y no requieren componentes adicionales, cuando la estructura fractal tiene la impedancia resonante de entrada adecuada. En general la dimensión fractal de una antena fractal predice pobremente su funcionamiento y aplicación. No todas las antenas fractales trabajan bien para una aplicación ó conjunto de aplicaciones dados. para encontrar el diseño fractal que mejor ajusta a la necesidad de las aplicaciones se requieren frecuentemente métodos*

de investigación y simulación de antenas por computadora.

Una antena fractal utiliza un diseño autosimilar con objeto de maximizar la longitud de materiales que pueden recibir o transmitir radiaciones electromagnéticas dentro de una superficie ó volumen dado.

Las antenas fractales están formadas por curvas que llenan el espacio y también se conocen como antenas multinivel. Su característica fundamental consiste en la repetición de un motivo sobre dos o mas tamaños de escalas, ó iteraciones, razón por la que las antenas fractales son muy compactas, multibandas o de banda ancha y tienen aplicaciones útiles en la telefonía celular y en la comunicación por microondas.

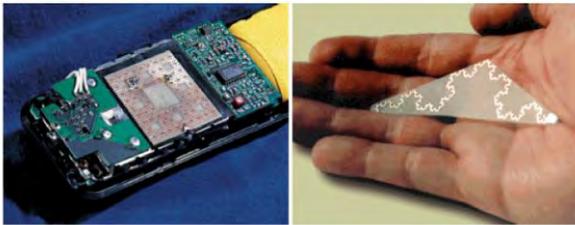


Figura 13. Antenas fractales para celulares.  
<http://classes.yale.edu/fractal/panorama>.

Un ejemplo de antena fractal como una curva que llena el espacio esta en la forma de una hélice fractal encogida, en donde cada línea de cobre es una pequeña fracción de una longitud de onda.

La respuesta de una antena fractal difiere marcadamente la de una antena tradicional, ya que es capaz de tener un funcionamiento muy bueno ó excelente en diferentes frecuencias de manera simultanea. Las antenas tradicionales están diseñadas para responder en un intervalo de frecuencia y las antenas estándar solo trabaja bien en ese intervalo.

Esta hace de las antenas fractales un excelente diseño para aplicaciones de banda ancha y multibanda. Además la naturaleza de las antenas fractales hace que su tamaño sea muy pequeño, sin el uso de componentes tales como inductores y condensadores.”



Figura 14. Antena Fractal donde la superficie de una hélice esta cubierta por una curva fractal de cobre.

Recientemente se publicó un artículo [9] en el cual se utiliza los terágonos para construir antenas con la forma de la isla ó copo de nieve de Koch que funcionan en multibandas y para microondas.

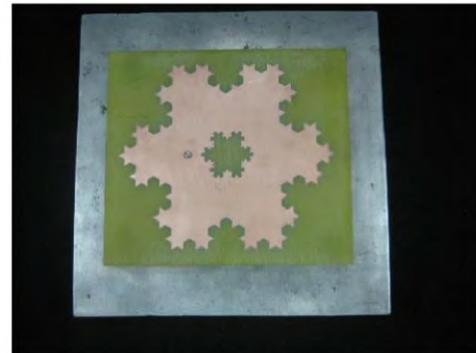


Figura 15. Antena fractal de alta direccionalidad.  
Referencias 10 y 11.

Se recomienda ver el sitio [www.fractena.com](http://www.fractena.com), de la compañía Fractal Antenna Systems fundada por Nathan Cohen para tener una información mas detallada de las diferentes y fascinantes aplicaciones de los fractales a nuestra vida diaria, y además ver como se hace realidad la ficción del hombre invisible. Terminaremos con una frase de N. Cohen refiriéndose a la “máquina fractal” que hace posible la invisibilidad de un objeto:

**“Esto no es magia, es física usando la tecnología de fractales. Es real, es genial y es el principio de algo muy grande.”**

**Referencias.**

1.- Benoit Mandelbrot How long is the coast of Britain? . Statistical self-similarity and fractional dimension. Science 155, 636-638. 1967. Reproducido en Classics on Fractals. Ed. Gerald A. Elgar, Addison Wesley, 1993.

2.- Lewis Fry Richardson. The problema of contiguity: an appendix of statistic of deadly quarrels. General Systems Yearbook 6, 139-187. 1961.

3.- Felix Hausdorff Dimension und äusseres mass Mathematische Annalen 79, 157-179. 1911

4.- Felix Hausdorff , Dimension and Outer Measure, 1918. Reproducido en Classics on Fractals. Ed. Gerald A. Elgar, Addison Wesley, 1993.

5.-B. Mandelbrot, The Fractal Geometry of Nature, 1982, W.H. Freeman and Company.

6.- Fractal Antenna. Wikipedia.

7.- Cohen, N. (Summer 1995). "Fractal Antennas". Communications Quarterly: 9.

8.- N. A. Saidatul, A. A. H. Azremi, R. B. Ahmad, P. J. Soh, and F. Malek (2009). "Multiband Fractal Planar Inverted F Antenna (F-Pifa) for Mobile Phone Application". Progress In Electromagnetics Research B 14: 127–148. doi:10.2528/PIERB0903080.

9.- Abdelati Reha, Abdelkebir El Amri, Othmane Benhammouch, Ahmed Oulad Said. CPW-Fed KOCH SNOWFLAKE Fractal Antenna for UWB Wireless Applications. Transactions on Networks and Communications. August, 2014 Vol.2 Issue 4. DOI: 10.14738/tnc.24.337

10.-Abbas Bin Younas Awan, Zubair Ahmed and Mojeeb Bin Ihsan, "A New High Directivity Fractal Antenna Based on the Modified Koch Snowflake Geometry" Asia Pacific Microwave Conference (APMC 2010) Dec 7-10, 2010, Yokohama Japan.

11.-Abbas Bin Younas Awan, "High Directivity Fractal Antenna," MS Thesis, College of E&ME, NUST, 2010.

**Apéndice.**

En este apéndice mostraremos que la ecuación funcional  $f(ax)=bf(x)$  tiene por solución:

$$f(x) = Ax^\alpha \text{ con } A \text{ cte y } \alpha = \frac{\log b}{\log a} \quad (21)$$

Para ello utilizamos los siguientes argumentos:

La ecuación funcional  $f(ax)=bf(x)$  se expresa como una función de iteración al definir

$$x_n = ax_{n-1}; y_n = by_{n-1}; \quad (A-1)$$

que nos permite escribir la ecuación funcional en la forma:

$$y_n = f(x_n) \quad (A-2)$$

la solución de las dos primeras ecuaciones de iteración esta dada por:

$$x_n = a^n x_0; y_n = b^n y_0; \quad (A-3)$$

si ahora despejamos n de ambas ecuaciones se encuentra:

$$n \log a = \log \frac{x_n}{x_0}; n \log b = \log \frac{y_n}{y_0} \quad (A-4)$$

eliminando el parámetro n de las ecuaciones (A-4), tenemos:

$$\log \frac{y_n}{y_0} = \left( \frac{\log b}{\log a} \right) \log \frac{x_n}{x_0} = \alpha \log \frac{x_n}{x_0}; \quad (A-5)$$

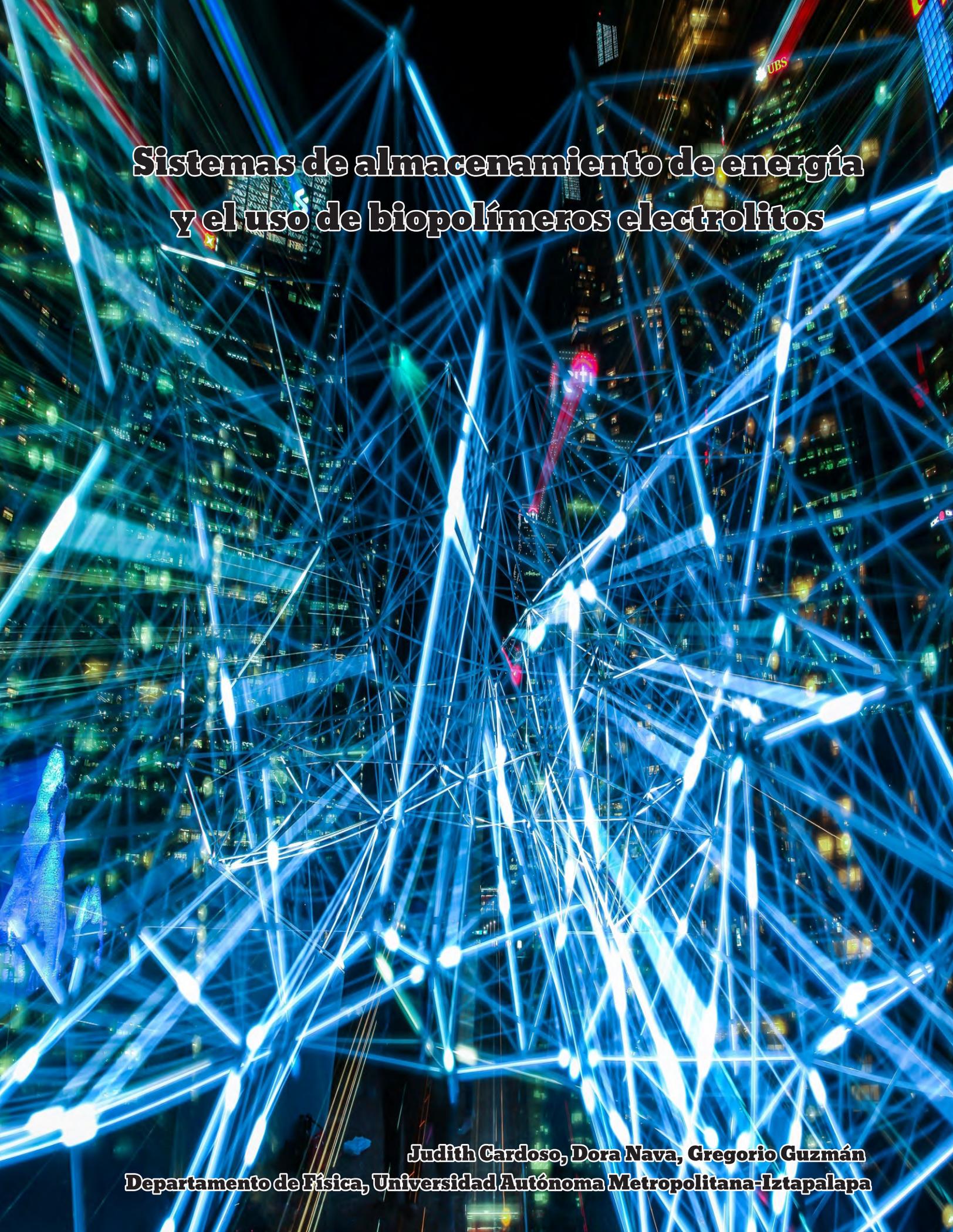
Donde

$$\alpha = \left( \frac{\log b}{\log a} \right)$$

de manera que se encuentra:

$$y_n = Ax_n^\alpha \text{ con } A = \frac{y_0}{x_0^\alpha}, \quad (\text{A-6})$$

finalmente utilizando la ecuación (A-2) se obtiene la ecuación (21).



**Sistemas de almacenamiento de energía  
y el uso de biopolímeros electrolitos**

**Judith Cardoso, Dora Nava, Gregorio Guzmán**  
**Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa**

### Resumen

El almacenamiento de energía se convirtió en un factor dominante en el desarrollo económico con la introducción generalizada de electricidad y químicos combustibles refinados, como el carbón, la gasolina, los biocombustibles y el hidrógeno, por lo que tiene un papel vital en el esfuerzo por combinar la prestación de servicios de energía sostenible. Existe una gran diversidad de sistemas de almacenamiento que dependen de su funcionamiento como son: mecánico (acumuladores hidráulicos); térmicos (acumulador de vapor, almacenamiento térmico) y electroquímicos (celdas de combustible, supercapacitores, y baterías). Las baterías, son celdas secundarias recargables, que se han desarrollado para actuar con un principio reversible. Las baterías de ión litio son las más prometedoras debido a que posee un potencial de descarga intrínseco de peso liviano. Este tipo de baterías contienen electrolitos líquidos inflamables que pone en riesgo la seguridad del sistema durante su operación. Por esta razón se ha propuesto sustituirlos por electrolitos sólidos no inflamables. El uso de materiales innovadores en baterías de ión litio, tales como biopolímeros, permite obtener materiales económicos, amigables al medio ambiente y con alta estabilidad electroquímica.

### Abstract

Energy storage systems have had a boom in electronic technologies powered by renewable energy systems. Petrochemical fuels in common use such as coal, gas, biofuels and hydrogen have become the dominant form of primary energy storage. On the other hand, the electrochemical systems (supercapacitors, fuel cells and batteries), considered as secondary storage systems, already are rechargeable systems since they generate electricity through electrochemical reactions, which are reversible. The batteries have been widely used mainly for application in mobile devices such as laptops, camcorders and mobile phones, without forgetting your application in the emerging industry of electric cars. The use of innovative materials in Lithium, such as biopolymers, batteries allows you to obtain economic, environmentally friendly materials with high electrochemical stability and the environment.

### Introducción

La energía renovable y la sostenibilidad energética

son uno de los grandes retos de la sociedad actual debido a la limitación de los combustibles fósiles, su precio elevado y los riesgos que conlleva la producción de la energía nuclear. La población actual mundial es de 6.000 millones de personas y se espera que para el año 2050 la población se duplique y el requerimiento de energía se espera que se triplique [1]. Las fuentes de energía deberán ser principalmente libre de carbono y dependerá del nivel de CO<sub>2</sub> atmosférico que se pueda tolerar respecto de su impacto sobre el cambio climático global. Se debe recordar que una gran parte de estas emisiones proviene de la quema de derivados del crudo del petróleo en motores de combustión interna en los sistemas de transporte: coches, camiones, etc.

La energía obtenida por estos medios es intermitente, debido a las variantes que experimentan las fuentes naturales, como por ejemplo: la velocidad del viento sobre las turbinas eólicas, la radiación solar en las fuentes fotovoltaicas, la altura de las olas del mar en las fuentes mareomotrices, entre otros. Como consecuencia se han desarrollado diferentes formas para almacenar la energía remanente a fin de utilizarlo cuando sea necesario y las condiciones de operación del sistema eléctrico lo permitan.

### Sistemas de almacenamiento

El almacenamiento de energía tiene un papel vital en el esfuerzo por combinar el suministro de energía sostenible con el estándar de servicios técnicos. Para los consumidores industriales, comerciales y privados es inaceptable una respuesta tardía a una demanda de energía y de los niveles de potencia requerida que puede conducir errores de aplicación. Los sistemas de almacenamiento de energía cumplen con los requisitos para el suministro de energía en la medida requerida por los consumidores.

Las tecnologías de almacenamiento de energía se dividen generalmente en tres grupos principales: mecánico, electromagnético y electroquímico (Figura 1) y dentro de esta clasificación se señalan a los sistemas de corta, mediana y larga duración. Los de corta duración son los sistemas mecánicos que incluyen: almacenamiento hidrobombado como energía potencial del agua a diferentes elevaciones; volantes, como energía cinética en aire comprimido; y "flywheels" como energía cinética en discos en rotación. Los de duración mediana son los de

almacenamiento electromagnético que incluye inductores SMES (Superconducting Magnetic Energy Storage) como energía electrostática y supercondensadores como energía en un campo magnético. Mientras que las de larga duración son las de almacenamiento electroquímico, incluye dispositivos de alta capacidad como los supercapacitores, celdas de combustible (acumulación de energía basada en hidrógeno); así como baterías[2].

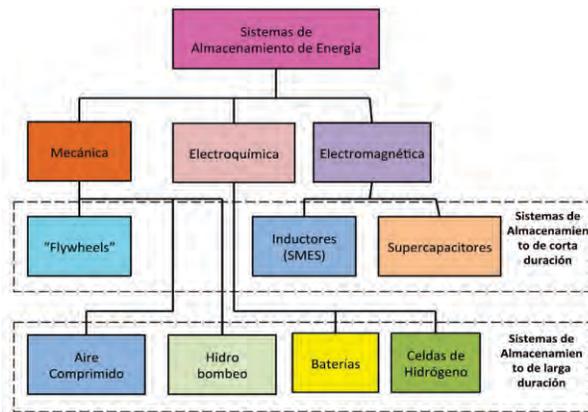


Figura 1. Clasificación de sistemas de energía [adaptado de la referencia 2]

### Supercapacitores

Un supercapacitor (ultracapacitor o double layer capacitor) es una nueva tecnología de almacenamiento de energía. Son dispositivos que tienen un principio de operación similar a un condensador tradicional. Sin embargo, su capacidad y corriente de descarga es mucho más alta y, por ello los supercapacitores se utilizan como unidades de almacenamiento en sistemas de potencia, vehículos, entre otros. La diferencia principal con respecto a los condensadores convencionales reside, por una parte, en que almacenan la energía en la interfase entre un electrodo conductor poroso y un electrolito líquido conductor, y por otra parte, la superficie aumenta mucho debido a la porosidad elevada del electrodo [3].

### Celdas de combustible

Se trata de un dispositivo electroquímico de conversión de energía similar a una batería, pero se diferencia, de esta última, debido a que permite el abastecimiento continuo de los

reactivos consumidos. Las celdas de combustible tienen grandes beneficios sobre las tecnologías convencionales basadas en la combustión y se emplean actualmente en muchas plantas de energía y en los automóviles eléctricos. Una celda de combustible consiste en dos electrodos separados por un electrolito. En el ánodo se ioniza el hidrógeno, perdiendo un electrón el cual pasa por un circuito y genera energía eléctrica. Por otro lado el hidrógeno llega al otro electrodo pasando por el electrolito y se combina con el oxígeno del aire lo que genera agua de residuo, sin utilizar ningún tipo de combustión, evitando la producción de gases contaminantes de aire que crean el smog. [5] (Figura 2). Hay dos tipos de celdas, las que utilizan membranas poliméricas de intercambio protónico y las que utilizan óxidos sólidos. Las primeras tienen ciertas ventajas como operar a bajas temperaturas, son ligeras y más compactas, lo que las hace ideales para aplicaciones en autos.

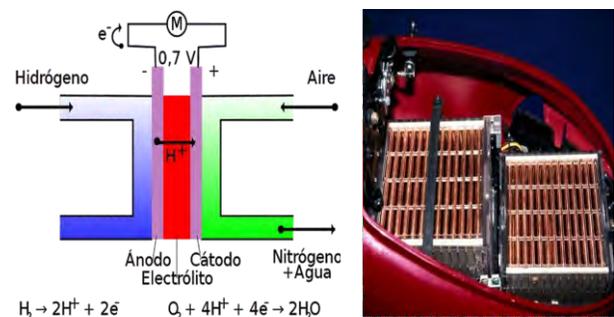


Figura 2. Funcionamiento de una celda de combustible basada en hidrógeno y su aplicación en un automóvil eléctrico [obtenido de la referencia 5]

Una de las ventajas es que el hidrógeno se puede producir a partir de una amplia variedad de fuentes de energía primaria, incluidas la energía solar y la eólica. Al comprimirse, ofrece una mayor densidad energética, que las baterías. Varias compañías automotrices han trabajado en el desarrollo de esta tecnología como Toyota, quien ha lanzado al mercado un auto de celda de combustible. Sin embargo, para utilizar al hidrógeno a escala global, se requieren avances significativos científicos y técnicos. Uno de los retos más importantes es desarrollar sistemas de

almacenamiento de hidrógeno económicamente accesibles y de fácil transporte, como es el caso de los 4 kg de hidrógeno que se necesitan para una distancia práctica de conducción, que ocuparía  $49 \text{ m}^3$ . El problema en el almacenamiento de hidrógeno consiste no solo en reducir su volumen, sino también en su baja absorción sobre diferentes materiales, su alta volatilidad y su rápida combustión, por lo que cualquier tecnología que lo emplee se enfrentará a estos problemas [1,4].

### Pilas y baterías

Una pila, es una celda primaria que produce electricidad en un proceso químico irreversible y es necesario eliminarla y sustituirla cuando se agota. Las baterías, son celdas secundarias acumuladoras, que actúan de acuerdo con un principio reversible y es posible recargarlas varias veces, conectándolas con una fuente de corriente eléctrica.

Estos dispositivos convierten la energía química contenida en sus materiales activos directamente en energía eléctrica por medio de reacciones de oxidación y reducción electroquímica. El tipo de energía generada es independiente de la combustión, y de las limitaciones del ciclo de Carnot dictado por la segunda ley de termodinámica; por lo tanto, las baterías presentan eficiencias más altas en la conversión de energía [4].

### Baterías Rocking chair (Ion -litio)

Las baterías secundarias de litio son las más prometedoras debido a que poseen un voltaje de descarga intrínseco con un peso relativamente ligero. En 1991, Sony lanzó al mercado el concepto revolucionario de una batería secundaria de litio de alta calidad; la llamada "batería de iones de litio" los iones de litio oscilan entre el ánodo y el cátodo a través de un electrolito líquido, como si fuese una mecedora balanceándose de un lado a otro (figura 3). Este comportamiento, en inglés se define como "rocking chair", de donde se deriva su nombre [5].

La demanda en el desarrollo de baterías de ion litio con mayor densidad energética, ha llevado al diseño de electrodos con voltajes arriba de 5.0 V, además de ofrecer un tiempo de vida largo, trabajando a temperaturas elevadas. Este tipo de baterías contienen electrolitos orgánicos inflamables, por lo que se pone en riesgo la seguridad del sistema durante su operación. Por esta razón se ha propuesto sustituir este tipo de electrolitos por electrolitos sólidos no inflamables. Actualmente, se están desarrollando polímeros para su uso como electrolitos en este tipo de sistemas de almacenamiento. Por lo tanto, la investigación de materiales poliméricos en combinación con moléculas orgánicas e inorgánicas, la hace un área novedosa en el desarrollo de los mismos [5].

### Materiales poliméricos y su aplicación en sistemas de almacenamiento de energía

Este tipo de baterías contienen electrolitos líquidos inflamables que pone en riesgo la seguridad del sistema durante su operación. Por esta razón se ha propuesto sustituirlos por electrolitos sólidos no inflamables. El uso de materiales innovadores en baterías de ion litio, tales como biopolímeros, permite obtener materiales económicos, amigables al medio ambiente y con alta estabilidad electroquímica [6].

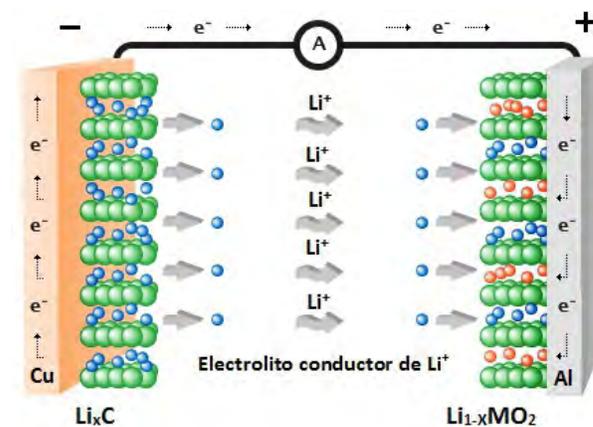


Figura 3. Funcionamiento del proceso de descarga de una batería de ion litio, donde  $M = \text{Fe}, \text{P}, \text{Co}$  o  $\text{Mn}$ .

Armand y colaboradores fueron pioneros en proponer los electrolitos poliméricos basados en el POE, poli(óxido de etileno) posteriormente evolucionaron hacia nuevos electrolitos de tipo gel, nanocompositos o membranas porosas de poli(fluoruro de vinilideno) [7-9].

De acuerdo a lo anterior, las baterías poliméricas recargables de ion litio (BPLi) utilizando polímeros electrolitos sólidos (PES) son consideradas como la siguiente generación de almacenamiento de energía para productos electrónicos portátiles y vehículos eléctricos. La estrategia para diseñar un PES debe considerar las siguientes propiedades:

- El polímero debe ser amorfo, ya que los polímeros semicristalinos sólo muestran una conductividad adecuada, por arriba de su temperatura de fusión, como es el caso del POE.
- La temperatura de transición vítrea debe de estar por debajo de la temperatura ambiente, y puede modificarse con disolventes denominados plastificantes. Este factor señala la factibilidad del movimiento cooperativo de las macromoléculas que permite la difusión de los iones litio.
- Se requiere estabilidad térmica y electroquímica; es decir una ventana de potencial amplia, en la que el electrodo no se modifique estructuralmente durante la carga-descarga.
- Alta conductividad iónica ( $10^{-4}$  a  $10^{-2}$  S/cm) que permita un buen rendimiento electroquímico.

En la actualidad, la mayoría de los electrolitos poliméricos presentan propiedades de transporte poco adecuadas, para cumplir con los requisitos que demanda el estado del arte de las baterías de ión litio. Bajo este criterio se ha intentado mejorar las propiedades de transporte incorporando líquidos iónicos (LIs) [10-12]. Los LIs están conformados de cationes orgánicos y de aniones tanto orgánicos como inorgánicos; las interacciones iónicas que ocurren en el medio, les brinda características muy interesantes, como estabilidad térmica, electroquímica, alta conductividad iónica y una volatilidad casi nula. Por lo tanto, resultan ser atractivos para transferir sus propiedades en polímeros electrolitos, cubriendo así los requisitos que se demandan, en el desempeño adecuado de las baterías [2-4]. Además se mejoran las propiedades mecánicas, obteniendo un electrolito sólido flexible que minimiza la separación entre las fases electrodo-electrolito [13-14]. Para electrolitos en baterías de ión litio se ha utilizado principalmente el líquido iónico compuesto por el catión 1-butil-1-metilpirrolidona (PYR11)<sup>+</sup> y el anión bis (trifluorometanosulfonil)imida (TFSI)<sup>-</sup>. Este líquido es denotado como PYR<sub>11</sub>TFSI.

### Biopolímeros electrolitos

Los biopolímeros son materiales potencialmente reciclables y que pueden obtenerse de fuentes renovables además de ser teóricamente muy atractivos. Este es el caso de los biopolímeros tales como el quitosano y el almidón [15]. El quitosano fue descubierto por Rouget en 1859, quien encontró que al tratar la quitina (provenientes de los caparazones de moluscos como el camarón) con una solución caliente de hidróxido de potasio se obtiene un producto soluble en ácidos orgánicos. El quitosano es el producto obtenido por la desacetilación de la quitina y su monómero es el 2-amino-2-desoxi-β-D-glucosa y posee mejores propiedades de reactividad y solubilidad. Se ha descrito como un polímero catiónico lineal, biodegradable, de alto peso molecular, de fácil aplicación y ambientalmente amigable (Figura 5) [16]. En el grupo de investigación de biopolímeros de la Dra. Cardoso (área de polímeros en la UAM-I) se ha investigado dos estructuras derivadas del quitosano, el quitosano sulfonado (QS) y el quitosano anfolítico (QA) con cargas positivas y negativas unidas por enlaces covalentes. Las propiedades que poseen estos polímeros



Figura 4. Diferente usos de los materiales poliméricos en aplicaciones de energía [adaptado de la referencia 6]

funcionalizados, les otorga la capacidad de disociar sales, ayudando a la conducción del ión litio (Tabla 1). La adición del LI (PYR11TFSI) proporciona un material sólido flexible, cuya conductividad se incrementa en dos órdenes de magnitud,  $10^{-4}$ , (Tabla1). Estas propiedades han permitido postular a ambos derivados del quitosano, como biopolímeros electrolitos.

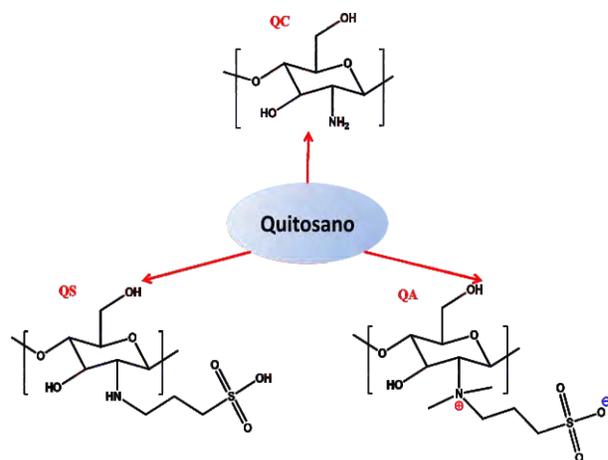


Figura 5. Derivados del quitosano. QC: quitosano desacetilado (95%); QS: quitosano sulfonato (94%); QA: quitosano con grupos anfolitos (46%).

Tabla 1. Conductividad iónica a 25 °C de diferentes biopolímeros.

Polímero	QS	QS/LiPF <sub>6</sub>	QA	QA/LiPF <sub>6</sub>	QA/PYR <sub>11</sub> TF SI	QA/LiPF <sub>6</sub> / PYR <sub>11</sub> TFSI
$\sigma_{25^\circ\text{C}} / \text{S cm}^{-1}$	$7.1 \times 10^{-8}$	$6.5 \times 10^{-8}$	$4.4 \times 10^{-7}$	$4.2 \times 10^{-6}$	$1.3 \times 10^{-4}$	$6.4 \times 10^{-5}$

## Conclusiones

Los sistemas de almacenamiento coadyuvan al uso de energías renovables. Las nuevas tecnologías en este aspecto requieren del uso de materiales amigables con el medio ambiente, económicos y de fácil acceso. El uso de biopolímeros derivados de quitosano y almidones como polímeros electrolitos ha tenido un gran auge. Se mostraron como ejemplo, la modificación química de quitosano y, que mediante la adición de una sal de litio (LiPF<sub>6</sub>) y un líquido iónico, se logró una conductividad iónica del orden de  $10^{-4}$  S/cm a 25 °C, lo que los convierte en buenos candidatos para ser utilizados en baterías de ión litio.

## Referencias

1. Bisquert, D. Cahen, S. Rühle, G. Hodes, and A. Zaban, "Physical chemical principles of

photovoltaic conversion with nanoparticulate, mesoporous dye- sensitized solar cells.," J. Phys. Chem. B 108, 8106 (2004).

2. Comparative Review of Long - Term Energy Storage Technologies for Renewable Energy Systems A. Andrijanovits, H. Hoimoja, D. Vinnikov. Electronics and Electrical Engineering 118, 21 (2012).

3. J.I. San Martín, I. Zamora, J.J. San Martín, V. Aperribay, P. Eguía. "Energy Storage Technologies for Electric Applications" Consultado el 5 de julio de 2014. Energy%20Storage%20Technologies%20for%20Electric%20Applications.webarchive

4. Pilas de combustible. National Geographic. Consultado 24 de junio de 2014 <http://www.nationalgeographic.es/medio-ambiente/calentamiento-global/fuel-cell-profile>.

5. D. Linden, T. B. Reddy, 2002, "Handbook of Batteries", 3a Ed, McGraw- Hill, USA.

6. N. Casado, G. Hernández, D. Mecerreyes, M. Armand. "Polímeros innovadores para almacenamiento de energía". Innovative Polymers for Energy Storage (IPES). Consultado 25 de junio 2014. [www.cicnetwork.es/upload/pdf/secciones/entornocic2.pdf](http://www.cicnetwork.es/upload/pdf/secciones/entornocic2.pdf)

7. M. Armand, J.M. Chabagno and M. Duclot, "Polyethers as solid electrolytes" in?P. Vashitshta, J.N. Mundy, G.K. Shenoy, Fast ion Transport in Solids. Electrodes and Electrolytes, North Holland Publishers, Amsterdam (1979).

8. F. Croce, G.B. Appetecchi, L. Persi & B. Scrosati Nanocomposite polymer electrolytes for lithium batteries Nature 394, 456-458 (1998).

9. A.M. Christie, S.J. Lilley, E. Stauton, Y.G. Andreev, P.G. Bruce, "Increasing the conductivity of crystalline polymer electrolytes" Nature, 433, 50 (2005).

10. D. MacFarlane, M. Forsyth, P. Meakin, N. Amini J. Phys. Chem. B 103, 4164 (1999).

11. G. B. Appetecchi, M. Montanino, D. Zane, M. Carewska, F. Alessandrini, S. Passerini, *Electrochim. Acta* 54, 1325 (2009).
12. Z. B. Zhou, H. Matsumoto, K. Tatsumi, *Chem. Eur. J.* 12, 2196 (2006).
13. V. Koch, C. Nanjundiah, G. Appetecchi, *B. Scr. J. Electrochem Soc.* 142 L116, (1995).
14. R. Marcilla, F. Alcaide, H. Sardon, J. A. Pomposo, C. Pozo-Gonzalo, D. Mecerreyes, *Electrochem. Commun.* 8, 482 (2006).
15. Finkenstadt, V.L, *Appl. Microbiol. Biotechnol.* 67, 735-745 (2005).
16. N. Matsumi, K. Sugai, M. Miyake , H. Ohno, *Macromolecules* 39, 6924 (2006).





