



Revista de la Facultad de
CIENCIAS de la UNI
REVCIUNI

UNIVERSIDAD NACIONAL DE INGENIERÍA

LIMA - PERÚ

© Copyright Octubre de 1999

Derechos reservados Universidad Nacional de Ingeniería
Facultad de Ciencias

Impreso en el Perú / Printed in Peru

Editor: **Armando Bernui Leo**

Asesoría: ***Félix Escalante Del Águila***
Manfred Horn
Luis Quispe Paredes
Holger Valqui Casas

Oficina de publicación:

Facultad de Ciencias - UNI
Av. Túpac Amaru 210 - Rímac
Teléfono: (0051) (1) 481-0824
E-mail: bernui@fc-uni.edu.pe

I.S.B.N.: 9972-753-23-9

Hecho el depósito legal N° 15010199-3597

VOLUMEN 4

NÚMERO 1

OCTUBRE 1999

Revista de la Facultad de
CIENCIAS de la UNI
REVCIUNI

UNIVERSIDAD NACIONAL DE INGENIERÍA

LIMA - PERU

Presentación

El presente número es signo del esfuerzo por crear la tradición de publicar los resultados de las investigaciones y, en general, los estudios de los científicos de la Facultad de Ciencias de la UNI.

REVCIUNI constituye un estímulo para producir y publicar resultados de nivel científico generosamente amplio.

Aquí queremos invitar a los miembros de la Facultad de Ciencias, y de la comunidad UNI, a presentar sus trabajos científicos, para ofrecerlos al conocimiento y crítica del país.

El editor

Investigación

Caracterización de células fotovoltaicas por medidas de photocorriente espectral

Carmen Eyzaguirre, Aníbal Valera, Dominik Essing ()*

RESUMEN

En este trabajo se presentan los primeros resultados de la colaboración UNI/HAHN-MEITNER-INSTITUT, obtenidos en el diagnóstico de celdas solares de alta eficiencia (Programa Euro-Joule), empleando un espectrómetro de photocorriente, desarrollado en la UNI.

En primer lugar se muestra una aplicación del sistema a una celda solar de silicio monocristalino de la empresa ISOFOTON (España), para luego resumir las evaluaciones efectuadas en dos tipos de celdas «Joule»: $CdS/Cu(In,Ga.)(S,Se)_2$ y $ZnSe/Cu(In,Ga.)(S,Se)_2$.

ABSTRACT

In this work, we present the first results of the collaboration UNI/HAHN-MEITNER-INSTITUT, obtained in the characterization of high efficiency solar cells (Programme Euro-Joule) with a home made photocurrent spectrometer.

(*) *Laboratorio de Óptica, Facultad de Ciencias UNI, Lima*
e mail: ceyzaguirre@uni.edu.pe

First, we show the application of the system to a monocrystalline silicon solar cell (Co. ISOFOTON /Spain). We describe next the results obtained with two types of «Joule» solar cells: CdS/Cu(In,Ga,)(S,Se)₂ and ZnSe/Cu(In,Ga,)(S,Se)₂.

Introducción

Las células solares constituyen hoy en día, en países como el Perú, la mejor alternativa de solución a muchos casos de requerimiento de energía eléctrica, como ha sido comprobado en innumerables casos de electrificación rural. No obstante, para que esta tecnología sea también rentable a mayor escala se hace necesario introducir nuevas tecnologías, no tan complejas y menos costosas, que las actualmente en uso [1].

En muchos laboratorios del mundo se trabaja en nuevas técnicas y diseños que simplifiquen la elaboración de celdas solares y por tanto puedan contribuir en un futuro cercano a que su costo se reduzca. Los logros más significativos se han dado en la tecnología de celdas solares de película delgada, teniendo como ejemplo las celdas solares de silicio amorfo con eficiencias comerciales del orden del 4 al 10%, producidas por la empresa UNI Solar (USA) [2] y las celdas solares policristalinas en base a CuInSe₂ desarrolladas en la Universidad de Stuttgart / Institut für Physikalische Elektronik, con eficiencias (en laboratorio) del orden del 14% [3].

En el Laboratorio de Óptica de la UNI se han elaborado y caracterizado diversos tipos de celdas solares, destacando en esta tarea las celdas solares de película delgada en base a CdS y como técnica de caracterización principal la espectroscopía de fotocorriente [4].

La formulación de este trabajo tuvo como base, de un lado, la experiencia propia ganada en la línea fundamental fotovoltaica y del otro lado, la conveniencia de elegir un tema de tesis apropiado para el nivel de Maestría* (Universidad de Andalucía), estableciéndose así los contactos necesarios y un programa de trabajo (mediciones, evaluaciones, etc.) a realizarse en la UNI. Los contactos establecidos fueron con EMILIANO PEREZAGUA GIL (ISOFOTON) y ULF BLIESKE (HAHN-MEITNER INSTITUT [HMI]/ Bereich Festkörperphysik).

En lo que sigue pasamos a describir el equipo empleado en la UNI para el análisis espectral de celdas solares, los primeros resultados obtenidos y una discusión de estos.

Parte experimental

Muestras

Las muestras empleadas en este trabajo fueron de dos tipos:

A. Celdas solares monocristalinas

(ISOFOTON), elaboradas en Sevilla (España) por la técnica convencional de difusión térmica.

B. Celdas solares de película delgada (HMI)

B1: CdS/Cu(In,Ga,)(S,Se)₂

B2: ZnSe/Cu(In,Ga,)(S,Se)₂.,

elaboradas por Siemens (Alemania) por técnicas de deposición al vacío.

Equipo de espectroscopía de fotocorriente

En la figura 1 se muestra de manera esquemática el equipo de fotocorriente espectral empleado en este trabajo:

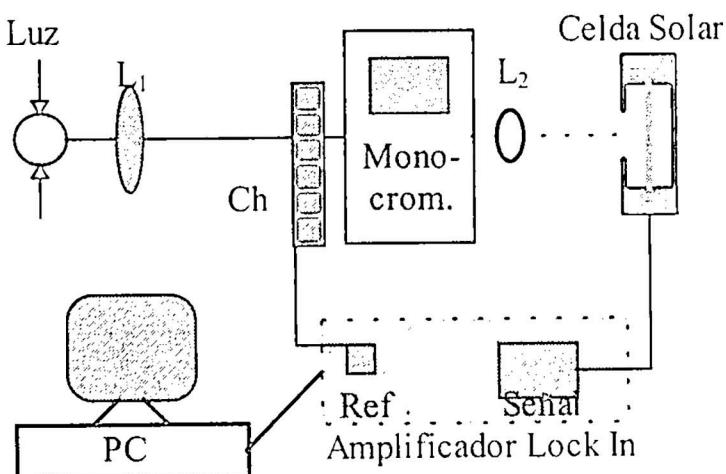


Figura 1: Diagrama esquemático del equipo de espectroscopía de Fotocorriente (UNI) empleado en el diagnóstico celdas solares.

El equipo ha sido ya descrito en otros trabajos [4] y está compuesto básicamente de los siguientes elementos: Una fuente de luz blanca (Lámpara Halógena 300 W), que es concentrada a la entrada de un monocromador (Carl Zeiss / M4 Q II S), debiendo pasar previamente por un modulador mecánico (Chopper). En estas condiciones se va a disponer de radiación monocromática en el rango

efectivo de 0,4 μm hasta 2,5 μm . Esta radiación es enfocada en la celda solar en evaluación, detectándose la photocorriente producida, la que es amplificada por la técnica Lock-In y derivada a una PC para su registro y procesamiento.

Resultados

Las Mediciones efectuadas se resumen a la determinación experimental del espectro de eficiencia cuántica (Número de fotoportadores que contribuyen a la corriente en relación al número de fotones incidentes) de las celdas solares, según el procedimiento ordinario (Ref. 4, por ejemplo).

A. Celda ISOFOTON

En la figura 2 se presenta el espectro de eficiencia cuántica obtenida para una celda de silicio monocristalino (CI10/ISOFOTON).

CELEA SOLAR C10 / ISOFOTON / EFICIENCIA CUÁNTICA / R= 0, 1

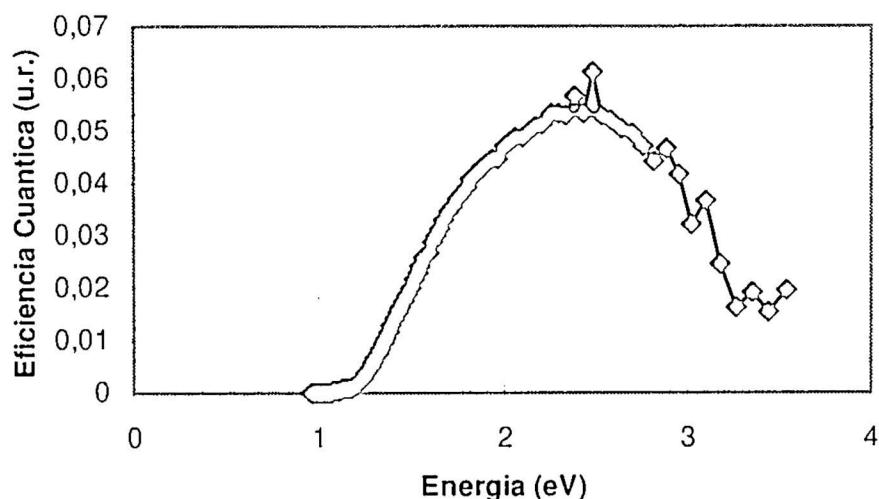


Figura 2: Respuesta espectral de la eficiencia cuántica de una celda solar monocristalina (CI10 / ISOFOTON), evaluada en la UNI.

Siguiendo el método ordinario de evaluación de este tipo de espectros [4] se linealiza la respuesta de eficiencia cuántica a partir de la relación:

$$\eta = \eta_0 (\hbar v - \hbar v_0)^\alpha$$

donde:

$\hbar v$ es la energía fotónica

$\hbar v_0$ es el umbral de energía correspondiente (el «gap», por ejemplo)

α un exponente característico.

Para la celda CI10 se encuentra a partir del espectro de la fig. 2, que esta empieza a responder a partir de la energía 1.038 eV, motivo por el cual se linealiza el resultado considerando:

$$h\nu_0 = 1.038 \text{ eV}$$

LN EF VERSUS LN (HV - 1038) / CL 10

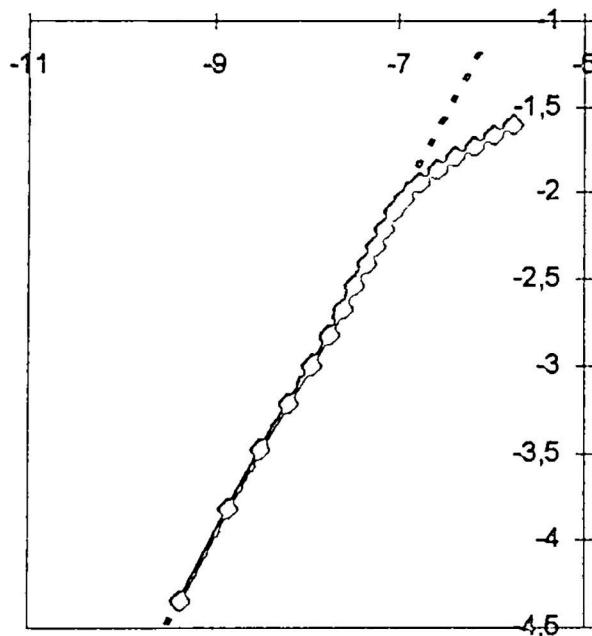


Figura 3: Gráfico de la linealización de la respuesta espectral (Fig. 2) de la celda solar CI10 en el rango inicial.

CELDA JOULE # 37 / CdS/CBD EFICIENCIA CUÁNTICA/ R=0,1

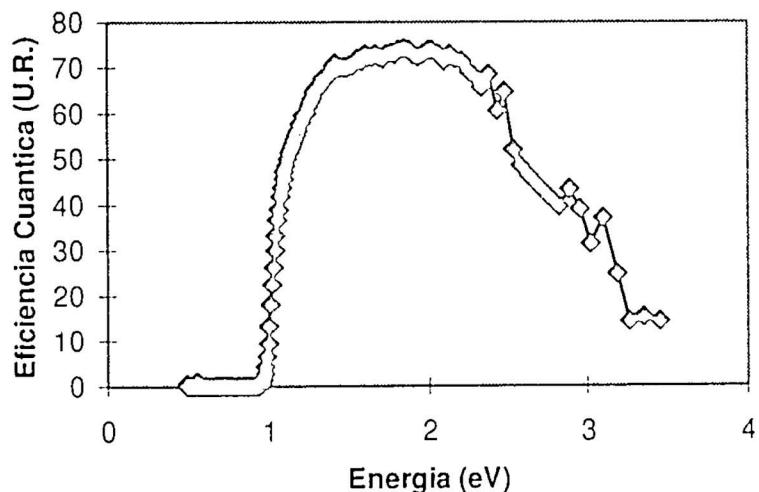


Figura 4: Respuesta espectral (R= 0.1) de la eficiencia cuántica de una celda solar «Joule» (SIEMENS / S# 37 / CdS/CBD), evaluada en la UNI.

En la figura 3 se muestra el resultado de la linealización, obteniéndose así:

$$\alpha = 1$$

$$\eta_0 = 148.29$$

B. Celdas Joule

En la figura 4 se presenta la respuesta espectral de la eficiencia cuántica de una celda Joule (S# 37 / CdS/CBD) evaluada en este trabajo. De modo análogo al caso monocristalino descrito, la evaluación de este espectro se efectúa según la fotorespuesta ocurrente y su correspondiente linealización, encontrándose así, para el rango espectral de 0.7 eV hasta cerca de 1.2 eV, la eficiencia global η :

CELDA JOULE S#37 CdS /CBD EFICIENCIA CUÁNTICA/ R = 0.05

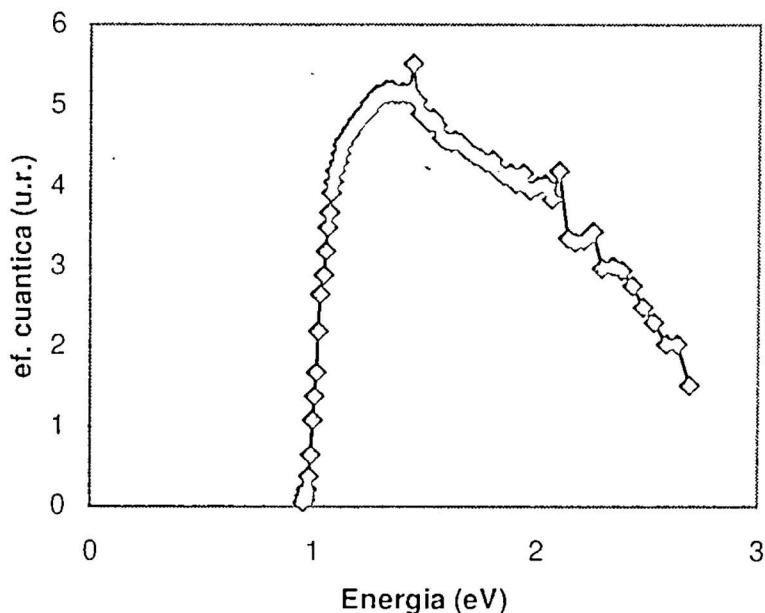


Figura 5: Respuesta espectral ($R=0.05$) de la eficiencia cuántica de una celda solar «Joule» (SIEMENS / S# 37 / CdS/CBD), evaluada en la UNI.

$$\begin{aligned} \eta = & 0.037 + A (hv - 0.747)^{1.5} \\ & + B (hv - 0.829)^2 \\ & + C (hv - 0.9425)^{2.5} \\ & - D (hv - 1.012)^2 \end{aligned}$$

Estos resultados deberán de ser confirmados y afinados con mediciones de mayor resolución, que se encuentran en curso. Así por ejemplo en la figura 5 se presenta un espectro de eficiencia cuántica obtenida para la muestra S#37 con rendija $R = 0.05$ y en la figura 6 finalmente presentamos el espectro de eficiencia cuántica ($R = 0.05$) obtenida para la muestra S#31 (ZnSe/CBD)

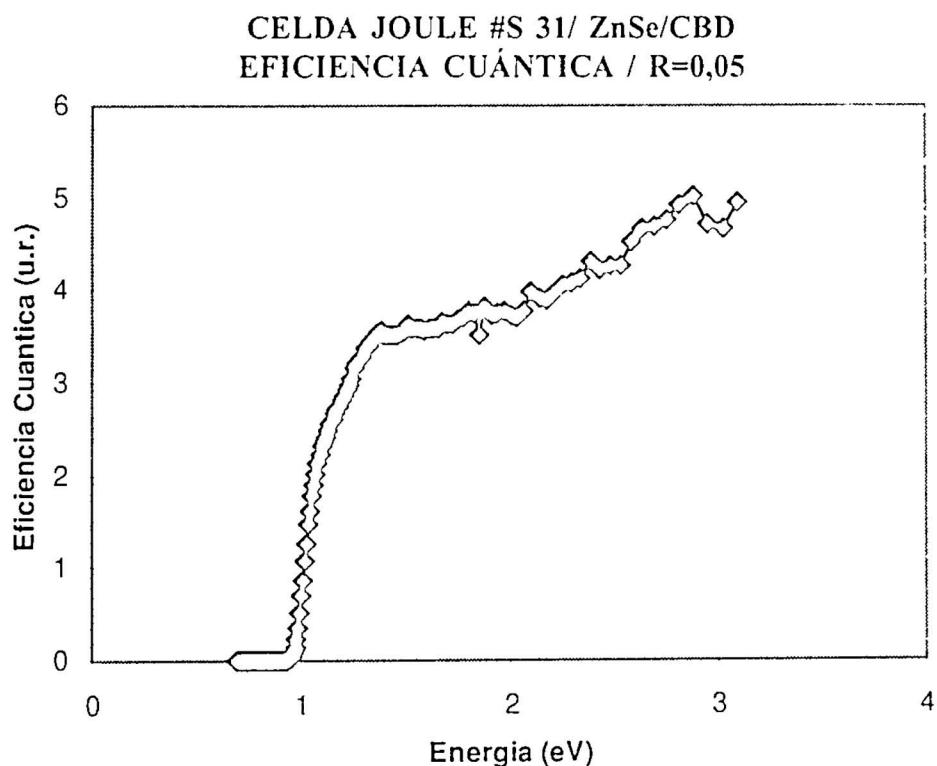


Figura 6: Respuesta espectral ($R=0.05$) de la eficiencia cuántica de una celda solar «Joule» (SIEMENS / S # 31 / ZnSe/CBD), evaluada en la UNI.

Discusión

Los resultados obtenidos en la muestra de silicio monocristalino (ISOFOTON) muestran el típico comportamiento de las homouniones pn, sirviendo en este caso de nivel de referencia de la validez de las mediciones realizadas con el equipo.

Las celdas «Joule» por tratarse de uniones de película delgada (multicapa), la correlación no es tan directa como en el caso monocristalino, restando aun establecer las condiciones de elaboración de las muestras para poder interpretar apropiadamente los resultados obtenidos.

El hecho que la ventana de captación espectral de las celdas Joule en base a ZnSe sea mayor que en el caso de CdS, se explica por ser el «gap» de ZnSe (2.7 eV) mayor que el de CdS (2.3 eV).

(*) Reconocimiento

Este trabajo se originó en el marco de una Tesis de Maestría (Carmen Eyzaguirre Gorvenia) en la línea de Energías Renovables, otorgada por la

Universidad de Andalucía, en cuya sede se cumplió con aprobar todos los cursos prerequisitos, con el compromiso de realizar la Tesis en el país de origen.

Los costos efectuados durante el viaje de estudios fueron asumidos por el Instituto General de Investigación de la UNI (IGI), la Facultad de Ciencias de la UNI y la Universidad de Andalucía, por lo cual manifestamos nuestro agradecimiento

Las celdas solares de ISOFOTON fueron gestionadas gracias a la mediación del Dr. Valeriano Ruiz Hernandez, cogestor de este trabajo, a quien estamos muy reconocidos por todo el apoyo recibido.

Las celdas solares del Proyecto Joule fueron cedidas gentilmente por el responsable alemán del mismo Dr. Ulf Blieske, por lo cual quedamos también muy agradecidos.

REFERENCIAS

1. Valera, A. «Energía Solar I». Ed. Hozlo, 394 pag. Lima/Perú, 1993
2. UNI-Solar (United Solar Systems Corp.). Reporte Interno 1996. 5278 Eastgate Mall / San Diego, CA 92121
3. Dimmler, B. Dietrich, R. Menner, R. Schock, H.W. «Fabrication and Theoretical Simulation of Cu(In,Ga)Se₂/(ZnCd)S Thin Film Solar Cells. Int. Symp. Trends and New Appl. Thin Films, Strasbourg, 1987, p. 103.
4. Mosquera, L. «Celda fotovoltaica de película delgada tipo Unión Schottky. Au/Cds/Ag usando la técnica de evaporación al vacío» Lic. en Física. UNI, Fac. de Ciencias 1997.

Óptica integrada: Elaboración y caracterización de guías de onda planas

*Luis Mosquera, Roddy Ramos, Enver Fernández, Jorge León,
Hernán Soldevilla, Guido Castillo, Aníbal Valera*, Mauro Lomer (*)*

RESUMEN

En esta publicación presentamos los primeros resultados obtenidos en la UNI en la técnica de elaboración y caracterización de guías ópticas. Este trabajo se inicio en el marco de un curso teórico experimental dictado por el Prof. Mauro Lomer en Agosto 98.

Se presenta la teoría básica, los métodos de elaboración empleados, el proceso de caracterización empleado y los resultados.

ABSTRACT

In this paper, we show the first results obtained in the UNI about the technology of elaboration and characterization of optical wave guides. This work was initiated in August 98, in relation to a Workshop organized in our Lab by Prof. Mauro Lomer.

We present here the basic theory, the applied elaboration methods, the characterization process and results.

(*) *Facultad de Ciencias / Laboratorio de Optica, UNI, Lima*
e mail: avalera@uni.edu.pe

* *Grupo de Ingeniería Fotónica /Universidad de Cantabria / Santander/ España*
e mail: lomer@teisa.unican.es

Introducción

La Optica Integrada se inició como línea de investigación aplicada a fines de los años 60. Desde un inicio, la intención fue desarrollar dispositivos ópticos de modo análogo a los circuitos integrados de la electrónica convencional. No obstante, en la actualidad los avances de la óptica integral constituyen la base de una nueva generación de componentes y dispositivos ópticos y optoelectrónicos que reemplazara a corto y mediano plazo la tecnología electrónica, por sus diversas ventajas, ante todo la velocidad de respuesta.

De modo análogo al caso de las fibras ópticas, la óptica integrada se fundamenta en el hecho que las ondas de luz pueden ser confinadas y guiadas por capas delgadas de material transparente. Combinando tales películas con estructuras apropiadas, la tecnología de óptica integrada ha logrado realizar una gran variedad de dispositivos, cuyas funciones abarcan una gran variedad de operaciones pasivas y activas. Así por ejemplo, la luz puede ser guiada, modulada, derivada, filtrada, concentrada, e incluso posibilitar la generación de radiación Láser.

Estas componentes son pequeñas y compactas, lo cual en analogía a los circuitos integrados de la electrónica, permiten reducir notablemente la configuración de los equipos y componentes ópticos convencionales, posibilitando así, incorporar en un solo elemento múltiples funciones, que usualmente requerirían de todo un Laboratorio para realizar tales montajes. Las primeras aplicaciones son desde ya muy significativas : comunicaciones ópticas, sensores ópticos, tratamiento de señales, etc.

En lo que sigue, nos limitamos a describir en la parte teórica, los lineamientos básicos de las guías ópticas dialécticas, en la parte experimental los métodos de fabricación usados en la UNI, así como el método de caracterización empleado. Finalmente presentamos los primeros resultados obtenidos.

Fundamento teórico

Las estructuras usadas ordinariamente como guías de ondas son capas dielécticas de geometría plana (películas, tiras) . En la figura 1 se muestra de manera esquemática, la configuración mas simple de una guía óptica, es decir a salto de índice, en donde una película plana paralela de índice de refracción n_f es colocada a modo de sandwich entre un soporte y una cubierta de índices de refracción menores n_s y n_c . Frecuentemente el material de cubierta es aire y el material de soporte vidrio, por tanto $n_c = 1$ y $n_s = 1.51$.

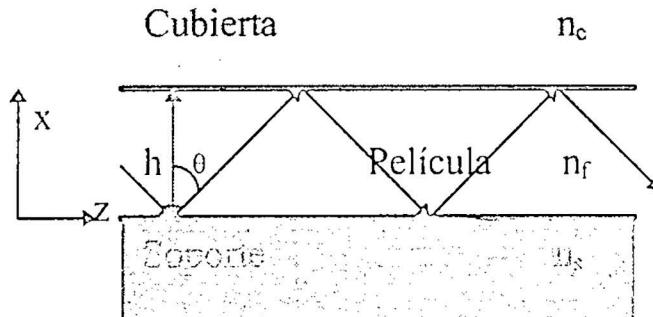


Figura 1: Vista esquemática de una guía de onda plana paralela, consistente de una película fina de espesor h e índice de refracción n_f , acotada entre un material de soporte (n_s) y una cubierta (n_c).[2]

En la figura 1 se muestra que para aquellos rayos que cumplen la condición de confinamiento, la luz se va a propagar en la dirección z , con una constante de propagación efectiva β [1].

El efecto de confinamiento se debe a la reflexión total que ocurre para incidencias internas con ángulos θ (ver Fig. 1) mayores que el ángulo crítico (θ_c), dado por la relación [1]:

$$\begin{aligned} \operatorname{sen} \theta_c &= n_s / n_f \\ \beta &= k n_f \operatorname{sen} \theta \end{aligned}$$

No obstante, no todos los ángulos θ están permitidos; sino un número discreto (Modos), que cumplen la condición de resonancia transversal [1]:

$$2 k n_f h \cos \theta - 2 \phi_s - 2 \phi_c = 2 v\pi$$

donde v es un entero (0, 1, 2...) que identifica al numero del Modo, ϕ_s y ϕ_c son los desfasajes que se producen en las respectivas interfaces :

$$\phi_s = \tan^{-1} (n_f^2 \operatorname{sen}^2 \theta - n_s^2)^{1/2} / (n_f \cos \theta)$$

$$\phi_c = \tan^{-1} (n_f^2 \operatorname{sen}^2 \theta - n_c^2)^{1/2} / (n_f \cos \theta)$$

La ecuación de resonancia constituye también la ecuación de dispersión de la guía óptica, relacionando la constante de propagación β como una función de la frecuencia ω y el espesor de la película h . Debido a que los posibles valores de β ocurren para:

$$k n_s < \beta < k n_f .$$

se suele definir un índice efectivo(N_i) por Modo **i**, dado por la expresión:

$$N_i = \beta_i / k = n_f \operatorname{sen} \theta_i$$

en donde: $n_s < N < n_f$.

La ecuación de dispersión constituye una relación trascendente, que debe ser resuelta numéricamente por aproximaciones sucesivas, en el caso de las guías a gradiente de indice.

Parte Experimental

A. Elaboración de las Guías ópticas

Los métodos usados para realizar guías de onda ópticas en vidrio se pueden dividir en dos clases: aquellas en que las capas son realizadas por la formación de un material sobre un sustrato (evaporación al vacío, por ejemplo) y aquellos en los cuales se forman en el mismo sustrato por algún proceso químico o reacción física (intercambio iónico, difusión).

A continuación nos limitamos a describir en este artículo dos de las técnicas empleadas en nuestro Laboratorio para la elaboración de guías ópticas: El método de intercambio iónico y el método de difusión.

El Método de intercambio iónico, es la técnica menos compleja, desde el punto de vista de equipamiento y consiste en modificar el índice de refracción del

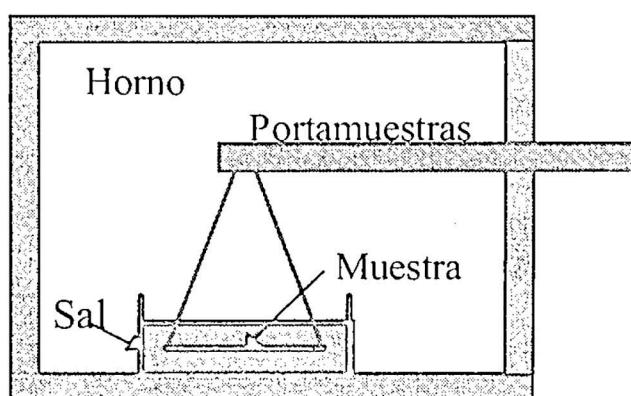


Figura 2: Diagrama esquemático del montaje experimental usado para elaborar guías ópticas.

sustrato (vidrio, por ejemplo) a partir de la superficie. Para lo cual se sumerge una lámina de vidrio en un baño de una sal que contenga iones metálicos móviles (K^+ , Cu^+ , Ag^+ , ...por ejemplo), como se muestra en la figura 2. Las variaciones de índice de refracción y/o profundidad de penetración dependen fuertemente de los parámetros del proceso, que son básicamente la temperatura y el tiempo del baño).

En nuestro caso se usó Nitrato de plata ($AgNO_3$), que en una cantidad de 125 gr. se fundió en un recipiente de acero inoxidable. Como substratos se usaron láminas de vidrio (portamuestras de microscopio). Manteniendo la temperatura del baño constante ($392^{\circ}C$), se elaboraron 4 muestras a diferentes tiempos de exposición: 10', 15', 20' y 25', resultando todas guías Multimodo, mostrándose un mínimo de 8 Modos para la muestra de 10'.

El método de difusión, es una de las técnicas más difundidas a nivel general, sobre todo en aplicaciones en la microelectrónica, su empleo en la elaboración de guías ópticas conlleva muchas ventajas prácticas, como por ejemplo la realización de diseños especiales.

En nuestra experiencia la difusión se realizó en fase sólida, a partir de un depósito previo de una capa metálica sobre el substrato (vidrio), como se muestra esquemáticamente en la figura 3.

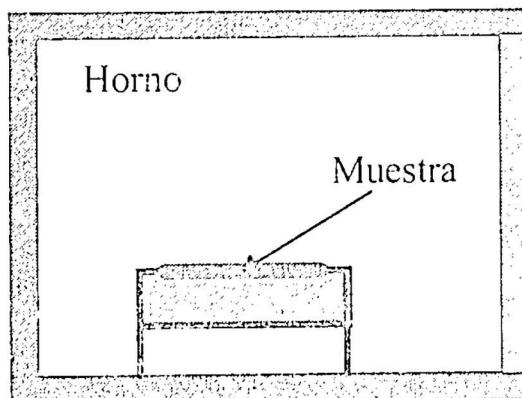


Figura 3: Diagrama esquemático del montaje experimental usado para elaborar guías ópticas por el método de difusión térmica por el método de intercambio iónico

Las capas metálicas depositadas por evaporación al vacío fueron respectivamente películas de cobre y plata, con espesores del orden de 0,1 micras. Luego del proceso de difusión el resto de la capa metálica se remueve con un solvente

apropiado. Se construyeron 5 guías ópticas en base a difusión de cobre y 8 en base a la difusión de plata, según los tiempos y temperatura descritos en la tabla 1: Todas ellas multimodo con un mínimo de 5.

Tabla 1 : Guías Ópticas elaboradas por el método de difusión, indicándose el tiempo que la muestra fue sujeta al tratamiento térmico y la temperatura correspondiente.

Muestra	Tiempo / min.	Temperatura / °C	Diseño
Cu 01	30	420	Planar
Cu 02	15	420	Planar
Cu 03	2	420	Planar
Cu 04	10	286	Circular
Cu 05	25	290	Cuña
Ag 01	30	420	Planar
Ag 02	10	365	Planar
Ag 03	10	305	Planar
Ag 04	10	292	Cuña
Ag 05	10	292	Circular
Ag 06	10	260	Planar
Ag 07	10	231	Planar
Ag 08	10	256	Planar

B. Evaluación de guías ópticas

El principal método de evaluación de guías ópticas consiste en excitar los distintos Modos propios desde un extremo de esta (Zona de ingreso) y detectar su salida del otro extremo (Zona de salida), para lo cual se acopla la radiación incidente (Láser) mediante un prisma de índice de refracción alto. En la figura 4 se presenta de manera esquemática el efecto de acople. Se hace incidir un haz de luz monocromática (Láser He-Ne: 633 nm, por ejemplo) sobre la superficie del prisma con un ángulo de incidencia (i), al penetrar en el prisma este es refractado y alcanza la guía en el punto P, penetrando en ella con un ángulo de refracción g .

Para asegurar un buen acoplamiento entre el prisma y la guía, es necesario que el espesor de la cuña de aire entre ellos sea inferior a $\lambda/2$ (316 nm), lo que en la práctica se logra ejerciendo una presión controlada sobre el substrato. En nuestro caso se logra realizar el acople mediante un aceite de inmersión (Di bromo naftalina, $n = 1.656$).

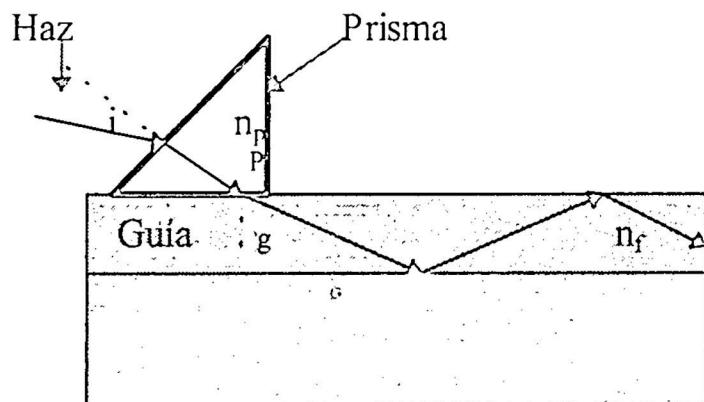


Figura 4: Acoplamiento de un haz incidente (Láser) en una guía óptica (n_g) mediante un prisma de índice de refracción alto (n_p) i : ángulo de ingreso al prisma, g : ángulo de un Modo de la guía. [2]

Para efectos experimentales se dispone el conjunto (Guía, prisma) sobre una mesa goniométrica rotatoria, de modo tal que sea posible variar el ángulo de incidencia en un gran rango angular, como se muestra en la figura 5. Sobre una pantalla se observa la luz proveniente del prisma.

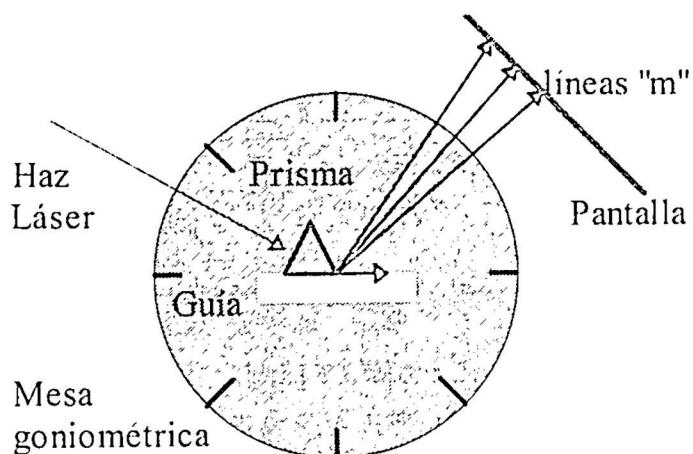


Figura 5: Diagrama esquemático del arreglo experimental empleado en la observación de los modos de las guías ópticas

En la experiencia, cuando la luz guiada sale por la extremidad de la guía, se mide el ángulo de ingreso i , lo que permite deducir el índice efectivo de cada Modo (figura 6). En el equipo descrito, la rotación de la mesa goniométrica se efectúa

manualmente y la determinación de los Modos propios se efectúa visualmente. Esta procedimiento resulta apropiado, si la guía dispone solo de algunos Modos, no obstante si se trata de una guía de muchos Modos, la metodología manual no es suficiente. Por tal motivo una próxima tarea del grupo es la de automatizar del sistema con el objeto de dar precisión a las medidas.

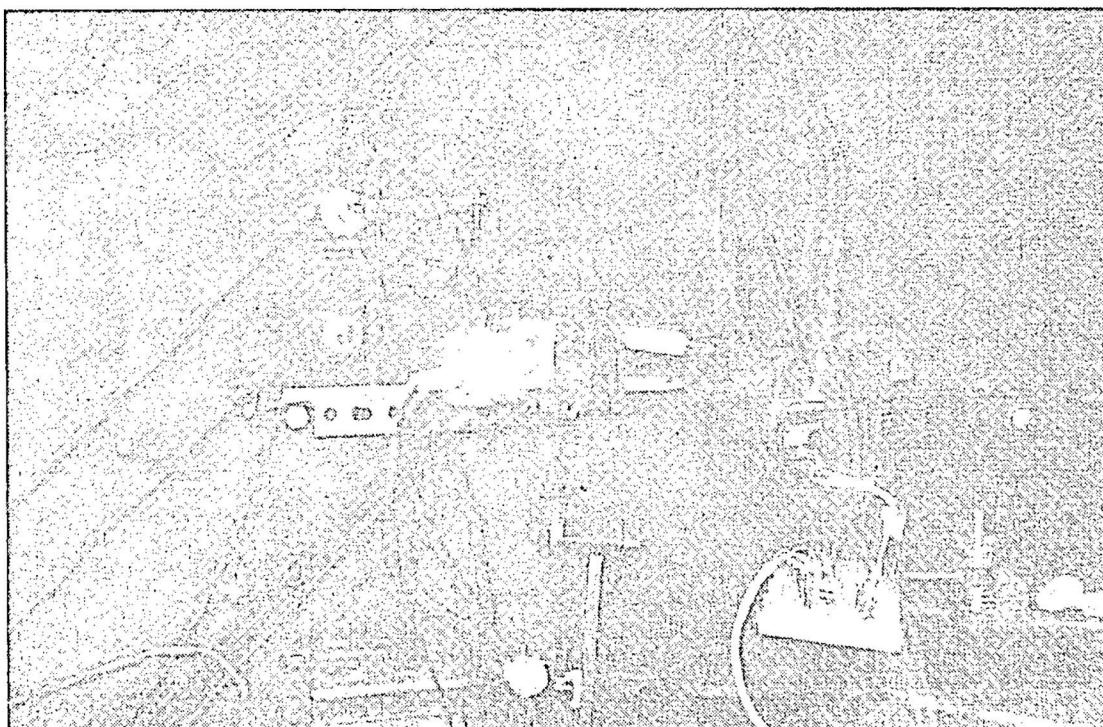


Figura 6: Detalle del procedimiento experimental de generación de Modos propios de una guía óptica /Lab UNI/.

C. Resultados experimentales

A continuación nos limitamos a presentar los resultados experimentales (Tabla 2) obtenidos manualmente con el montaje de la figura 5 en base a la muestra Ag08, obtenida por difusión térmica. Esta muestra es la única que muestra pocos Modos propios, lo que facilita su evaluación.

Tabla 2: Resumen de parámetros modales obtenidos para la guía óptica Ag08

Modo	Angulo incidencia	Indice efectivo	Angulo del Modo
0	28.75	1.677	88
1	27.75	1.673	85.5
2	26.25	1.667	83

La solución de la ecuación de resonancia para esta muestra (Ag 08), dio como resultado un índice de refracción de la guía óptica $n_f = 1.678$ y un espesor efectivo $h = 4.513 \mu\text{m}$.

Discusión de los resultados

Los resultados aquí presentados representan un avance respecto a la tarea sistemática de fabricación y caracterización de guías ópticas que se tiene por delante.

Un análisis interferométrico de las muestras realizadas permiten afirmar que las muestras realizadas por difusión térmica son de mucho mejor calidad que las realizadas por intercambio iónico, notándose en estas últimas irregularidades tipo burbujas.

Con respecto a los resultados obtenidos con la muestra Ag 08, estos son coherentes con la teoría, no obstante la limitación, respecto a la excitación de solo tres modos se puede explicar por el hecho de usar un líquido de contacto con el prisma, con lo cual el ángulo límite de acople se fija alrededor de 81° . Medidas precisas a realizar podrán confirmar estas conclusiones.

Reconocimiento

Los experimentos de óptica Integral y enfoque teórico descritos fueron realizados en el marco de un Curso Teórico/Experimental desarrollado en nuestros Laboratorios por el Profesor Mauro Lomer de la Universidad de Cantabria, entre el 10 y 21 de Agosto 1998, lo cual ha permitido abrir una línea de trabajo de implicancias tecnológicas importantes, por lo cual quedamos muy reconocidos.

La realización de este curso tuvo el apoyo del Instituto General de Investigación de la UNI (IGI), por lo cual quedamos también muy reconocidos.

REFERENCIAS

1. Tamir, T. «*Integrated Optics*». Springer Verlag. Berlin 1982.
2. Lomer, M. «*Optica Integrada*». Edición especial, próximo a publicarse.

Técnica de control de vibraciones

Jorge Luis Palacios Felix ()*

Introducción

El objetivo de este trabajo es describir la técnica de control óptimo que puede ser aplicada en el estudio y simulación de las respuestas de vibraciones de estructuras flexibles como puentes sujetas a excitaciones de cargas dinámicas. La ley de control óptimo de lazo cerrado, como problema regulador es utilizado. El modelo del sistema está gobernada por ecuaciones diferenciales parciales de la viga de Euler-Bernoulli apoyada en los extremos. Para estudiar la respuesta dinámica controlada, aproximamos el modelo a través de ecuaciones diferenciales ordinarias de funciones modales. La simulación numérica es resuelta por programación en Matlab para demostrar la efectividad del control activo.

(*) Universidad Nacional de Ingeniería, Facultad de Ciencias, Casilla Postal 31-139,
Lima - Perú.

Modelamiento de un puente

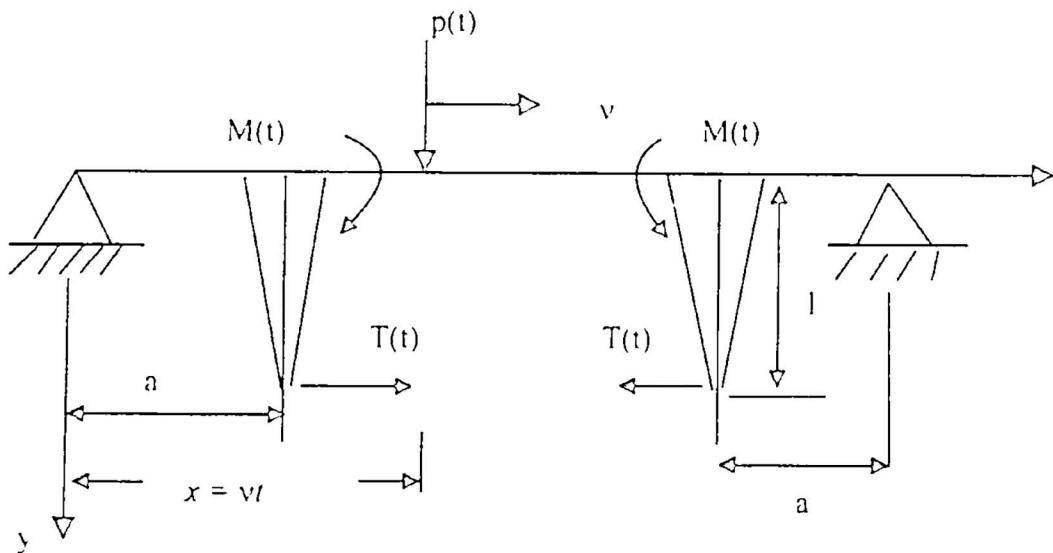


Figura 1: Mecanismo de control activo*

Consideramos un puente de una sola extensión idealizado por una viga de Euler-Bernoulli con apoyos simples. El mecanismo de control mostrado en la figura 1 es usado para el control de la vibración de puentes y la ecuación de movimiento del sistema mostrada en dicha figura es

$$EI \frac{\partial^4 y}{\partial x^4} + m \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = P\delta(x - vt) + M(t)\delta'(x - a) - M(t)\delta'(x - L + a) \quad (0.1)$$

$$M(t) = Sl[u(t) + ly'(a, t) - ly'(L - a, t)] \quad (0.2)$$

Donde

- E = módulo de Young.
- I = momento de inercia de la sección de la viga.
- m = masa por unidad de longitud.
- δ' = primera derivada de la función delta de Dirac.
- a = distancia desde el poste al próximo apoyo.
- v = velocidad constante de la carga dinámica.
- L = longitud de la viga.
- y = desplazamiento lateral.
- $M(t)$ = momento de control.
- S = rigidez del resorte.

l = longitud del poste.

$u(t)$ = representa la elongación o comprensión en el resorte debido al mecanismo de control.

$y'(a, t)$ y $y'(L - a, t)$ = representa la elongación o comprensión debido a la deformación de la viga.

Son consideradas las condiciones de frontera:

$$EI \frac{\partial^2 y(0, t)}{\partial x^2} = y(0, t) = 0; \quad EI \frac{\partial^2 y(L, t)}{\partial x^2} = y(L, t) = 0 \quad (0.3)$$

Solución modal

La solución de la Ec. (0.1) es asumida como

$$y(x, t) = \sum_{j=1}^{\infty} \phi_j(x) A_j(t) \quad (0.4)$$

donde A_j = coordenada generalizada del modo j ; y $\phi_j(x) = \sin(j\pi x/L)$ satisfaciendo las ecuaciones diferenciales

$$EI \frac{d^4 \phi_j(x)}{dx^4} = \omega_j^2 m \phi_j(x) \quad (j = 1, 2, \dots) \quad (0.5)$$

y las cuatro condiciones de frontera en los extremos de la viga. Considerando su valor de la función $\phi_j(x)$ en la Ec. (0.4), tenemos

$$y(x, t) = \sum_{j=1}^{\infty} \sin\left(\frac{j\pi x}{L}\right) A_j(t) \quad (0.6)$$

sustituyendo esta ecuación en la Ec. (0.1), aplicando las relaciones de ortogonalidad de las funciones $\sin(j\pi x/L)$, $j = 1, 2, \dots$ y usando las propiedades de la función delta de Dirac, obtenemos las ecuaciones diferenciales ordinarias en términos de los modos normales:

$$\ddot{A}_j + \omega_j^2 A_j(t) = \frac{2P}{mL} \sin(\Omega_j) - B_j [u(t) + \sum_{k=1}^{\infty} C_k A_k(t)] \quad j = 1, 2, \dots \quad (0.7)$$

donde $\Omega_j = j\pi v/L$; $B_j = (4Slj\pi) / L^2 m$ cos $(j\pi a/L)$ para j impar; $B_j = 0$ para j par. $C_k = ((2l\pi k) / L) \cos(k\pi a / L)$ para k impar, $C_k = 0$ para k par. La frecuencia natural ω_j es obtenido de

$$\omega_j^2 = \frac{j^4 \pi^4}{L^4} \frac{EI}{m} \quad (0.8)$$

El problema de control óptimo regulador

Consideramos un problema de regulador de estado. Básicamente, la solución del problema regulador de estado lleva a un sistema de retroalimentación óptimo con la propiedad que las componentes del vector de estado son mantenidos cerca de cero sin gasto excesivo de control de energía. Consideramos el sistema lineal de estado

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{A}\mathbf{x}(t) + \mathbf{B}\mathbf{u}(t) + \mathbf{d}(t); \quad \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \quad (0.9)$$

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{C}\mathbf{x}(t) \quad (0.10)$$

donde $\mathbf{x} = \mathbf{x}(t)$ es un vector $n \times 1$ que representa al estado del sistema; $\mathbf{u} = \mathbf{u}(t)$ es una variable de control irrestringida de $r \times 1$; \mathbf{A} y \mathbf{B} son matrices de dimensiones apropiadas; $\mathbf{d} = \mathbf{d}(t)$ es un vector $n \times 1$ que representa la perturbación; $\mathbf{y} = \mathbf{y}(t)$ es un vector $m \times 1$ que representa las variables de salida; y \mathbf{C} es la matriz de dimensión apropiada. Una función objetivo o de costos es usualmente definida en términos de aquellas especificaciones diseñadas. La minimización de la función costo lleva a una estrategia de control óptimo, la función objetivo es escogido como una función cuadrática la forma

$$J = \frac{1}{2} [\mathbf{y}(t_f)]^T \mathbf{S}_0 [\mathbf{y}(t_f)] + \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_f} \left([\mathbf{y}(t)]^T \mathbf{Q}_0 [\mathbf{y}(t)] + \mathbf{u}^T(t) \mathbf{R}(t) \mathbf{u}(t) \right) dt \quad (0.11)$$

donde \mathbf{S}_0 , \mathbf{Q}_0 , e \mathbf{R} son matrices ponderadas de dimensiones apropiadas; \mathbf{S}_0 e \mathbf{Q}_0 deben ser por lo menos semidefinida positiva; \mathbf{R} debe ser definida positiva; También las matrices $\mathbf{C}^T \mathbf{S}_0 \mathbf{C}$ y $\mathbf{C}^T \mathbf{Q}_0 \mathbf{C}$ son semidefinidas positivas y que el sistema de Ecs. (0.9) y (0.10) son completamente observables.

Sustituyendo $\mathbf{y}(t)$ ** en la Ec. (0.11) obtenemos la relación

$$J = \frac{1}{2} [\mathbf{x}(t_f)]^T \mathbf{C}^T \mathbf{S}_0 \mathbf{C} [\mathbf{x}(t_f)] + \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_f} (\mathbf{x}^T(t) \mathbf{C}^T \mathbf{Q}_0 \mathbf{C} \mathbf{x}(t) + \mathbf{u}^T(t) \mathbf{R} \mathbf{u}(t)) dt \quad (0.12)$$

La condición necesaria para una solución óptima para el problema regulador

puede ser obtenido de la formulación Hamiltoniano. Para el problema regulador, el Hamiltoniano es definido como:

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \lambda) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{C}^T \mathbf{Q}_0 \mathbf{C} \mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{u}^T \mathbf{R} \mathbf{u} + \lambda^T (\mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{B} \mathbf{u}) \quad (0.13)$$

en el cual $\lambda = \lambda(t)$ es un vector de $n \times 1$ y denota las variables de costos (multiplicador de Lagrange).

La variable de costo $\lambda(t)$ sea definida como

$$\lambda(t) = \mathbf{K}(t) \mathbf{x}(t) \quad (0.14)$$

para todo $t \in [t_0, t_f]$. La minimización de la función objetivo J da el control óptimo:

$$\mathbf{u}(t) = -\mathbf{R}^{-1} \mathbf{B}^T \mathbf{K}(t) \mathbf{x}(t) \quad (0.15)$$

El control dado por la Ec. (0.15) depende solamente sobre el estado actual del sistema y así este representa un control de lazo cerrado. Donde $\mathbf{K}(t)$ se le llama matriz de Riccati que satisface la ecuación diferencial:

$$-\dot{\mathbf{K}}(t) = \mathbf{K}(t) \mathbf{A} + \mathbf{A}^T \mathbf{K}(t) - \mathbf{K}(t) \mathbf{B} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{B}^T \mathbf{K}(t) + \mathbf{C}^T \mathbf{Q}_0 \mathbf{C} \quad (0.16)$$

para todo $t \in [t_0, t_f]$, con la condición de frontera

$$\mathbf{K}(t_f) = \mathbf{C}^T \mathbf{S}_0 \mathbf{C} \quad (0.17)$$

Construcción del espacio de estado

Considerando los modos controlados (modos impares), de la Ec. (0.7) resulta:

$$\ddot{A}_1(t) + \omega_1^2 A_1(t) = \frac{2P}{mL} \operatorname{sen} \Omega_1 t - B_1 [u(t) + C_1 A_1(t) + C_3(t)] \quad (0.18)$$

$$\ddot{A}_3(t) + \omega_3^2 A_3(t) = \frac{2P}{mL} \operatorname{sen} \Omega_3 t - B_3 [u(t) + C_1 A_1(t) + C_3(t)] \quad (0.19)$$

Definiendo las variables de estado como

$$\begin{array}{ll} x_1(t) = A_1 & x_2(t) = \dot{A}_1 \\ x_3(t) = A_3 & x_4(t) = \dot{A}_3 \end{array}$$

Las Ecs. (0.18 y 0.19) pueden ser reescritas en la forma de estado de acuerdo al problema regulador

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{A}_c \mathbf{x}(t) + \mathbf{B}_c \mathbf{u}(t) + \mathbf{d}(t) \quad (0.20)$$

donde

$$A_c = A - BB_j C_j$$

$$B_c = -B B_j$$

$$d(t) = Br(t)$$

En las ecuaciones precedentes, A , B , B_j , $r(t)$, y C_j son dados por

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -\omega_1^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -\omega_3^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}_j = \begin{pmatrix} B_1 \\ B_3 \end{pmatrix}$$

$$r(t) = \frac{2P}{mL} \begin{pmatrix} \sin \Omega_1 t \\ \sin \Omega_3 t \end{pmatrix}, \quad C_j = (C_1 \quad 0 \quad C_3 \quad 0)$$

Asúmese que solamente una señal de medición está disponible. Esta señal representa la razón de la rotación de los postes y es expresado por

$$y(t) = \mathbf{C}\mathbf{x}(t) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{C_1}{l} & 0 & \frac{C_3}{l} \end{pmatrix} \mathbf{x}(t) \quad (0.21)$$

Como el rango de \mathbf{C} es la unidad, las matrices \mathbf{S}_0 y \mathbf{Q}_0 son de dimensión 1×1 . También, la dimensión de \mathbf{R} es 1×1 dado que solamente una señal de control es abastecido al sistema.

Simulación numérica

Un conjunto de entradas de datos en la tabla 1 es usada en este trabajo para examinar la respuesta de las vibraciones de un puente debido a una carga dinámica bajo un sistema de control activo.

Tabla 1

Entrada de parámetros para el estudio de simulación de control activo.

$$\begin{aligned}
 L &= 100 \text{ ft (30,5m)}; \quad a = 10 \text{ ft (3,05m)}; \\
 f_0 &= 20 \text{ kips (89000N)}; \quad EI = 1210^{10} \text{ lb - in}^2; \\
 m &= 0,3 \text{ lb - s}^2 / \text{in}^2 (2,07 \times 10^{-3} \text{ Ns}^2 / \text{mm}^2); \\
 v &= 60 \text{ fps (18,3m/s)}; \quad l = 3 \text{ ft (0,915m)} \\
 S &= 62,5 \text{ kips/in. (10949,8 N/mm)} \quad x_c = L/2 \text{ m.}
 \end{aligned}$$

La respuesta completa de la deflexión en el centro del puente, asumiendo condiciones iniciales nulas. Se muestra diferentes valores para Q_0 , S_0 , y R en las siguientes figuras 3 y 4. En los ensayos por computadora son obtenidos los valores respectivos de Q_0 , S_0 y R para hacer un efecto de reducción de la deflexión respuesta del sistema (del puente con mecanismos de control).

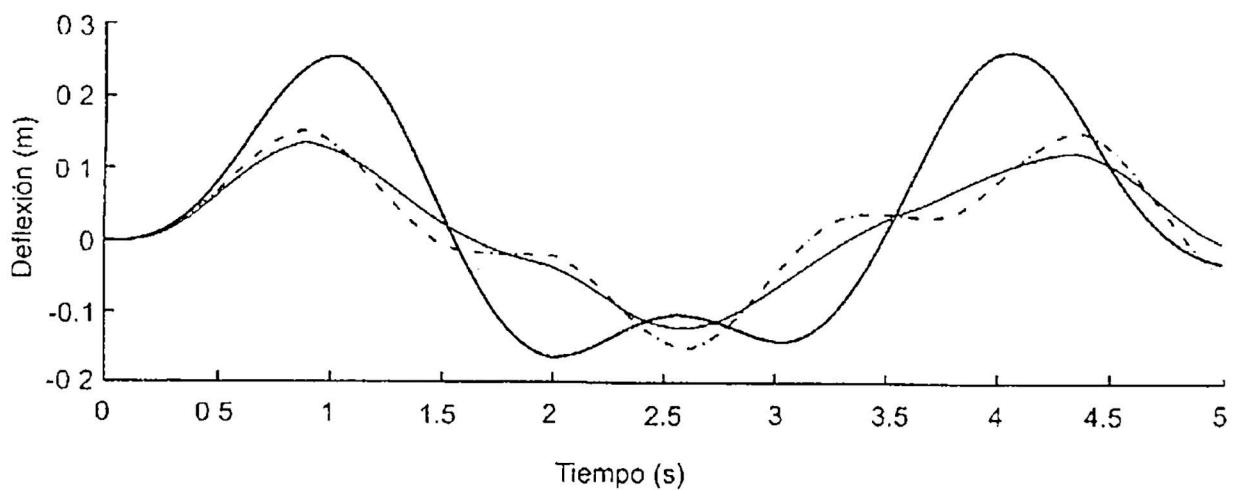


Figura 2. Respuesta de la deflexión en el centro considerando tres modos para matrices ponderadas --, $R = 9,5e4$, $Q_0 = 1000$, $S_0 = 0$; -., $R = 1e8$, $Q_0 = e5$, $S_0 = 100$; ..., sin control y los controles óptimos.

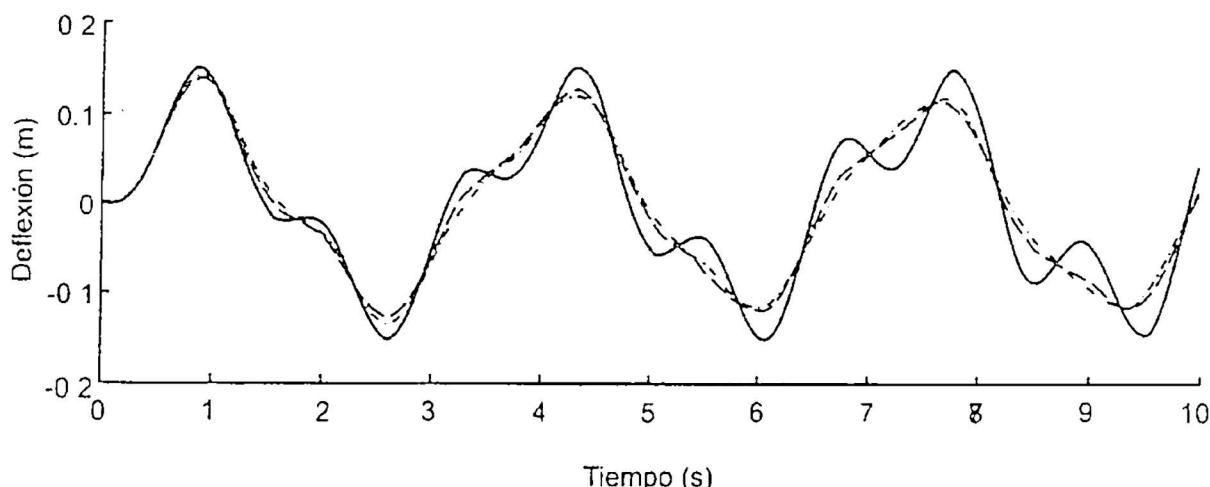


Figura 3. Respuesta de la deflexión en el centro considerando tres modos para matrices ponderadas --, $R = 5e5$, $Q_0 = 1000$, $S_0 = 100$; -, $R = e6$, $Q_0 = e4$, $S_0 = 100$; ..., sin control y los controles óptimos.

Conclusión

1. Hemos utilizado la teoría clásica de control óptimo, en la simulación numérica se observa que las matrices ponderadas influyen en la minimización de la respuesta de vibración de un puente sujeta a una carga dinámica.
2. Hemos resuelto la matriz de Riccati en función del tiempo, mientras que en otras investigaciones sobre el control de vibraciones de edificios sujetas a excitaciones sísmicas se ha utilizado a la matriz de Riccati como constante.
3. La importancia de controlar los parámetros como masa, resorte y amortiguador para el diseño del sistema es lo mismo que saber la posición de actuadores y sensores del mecanismo de control.
4. El método de control óptimo estudiado tiene la capacidad de controlar activamente la vibración de una viga sometida a una carga dinámica. El algoritmo de control regulador es usado cuando, posiblemente, la perturbación sea desconocida y examinar el mejor desempeño obtenido.

REFERENCIAS

- 1) **Abdel-Rohman, M. Leipholz, H. H.**, *Active Control of Flexible Structures* *Journal of the Structural Division, ASCE Vol. 104, N° ST8, Proc paper 13964, Aug 1978*, pp. 1251-1266.
- 2) **Athans, M. and Falb, P. L.**, *Optimal Control*. McGraw-Hill, New-York, 1966.
- 3) **Balas, M. J.**, *Active Control of Flexible Systems*. *Journal of Optimization Theory and Applications 25* pp. 415-420, 1978.

Enumeración de ceros de polinomios complejos

William Carlos Echegaray Castillo (*)

El presente trabajo encuentra la forma de enumerar ceros de polinomios complejos. Los algoritmos para enumerar ceros polinomiales usan básicamente el Teorema de Sturm y el Principio del Argumento en ciertas regiones, es decir, en cada una de las regiones del plano complejo dadas, saber el número de ceros existen (que pueden ser un círculo, un rectángulo, etc.); cabe indicar que a partir de la enumeración también podemos aislar las raíces de polinomios complejos.

1. Introducción

El objetivo del presente trabajo es calcular las raíces del polinomio

$$p(z) = a_n z^n + a_{n-1} z^{n-1} + a_{n-2} z^{n-2} + \dots + a_1 z + a_0, \quad (1)$$

donde $\{a_0, a_1, \dots, a_{n-1}, a_n\} \subset \mathbb{C}$ e $a_n \neq 0$, además restringimos, los coeficientes a la siguiente forma $Re(a_i), Im(a_i) \in \mathbb{Q} \quad \forall i = 0, 1, 2, \dots, n$.

(*) Universidad Nacional de Ingeniería, Facultad de Ciencias, Escuela Profesional de Matemática.

A este tipo de polinomio le llamamos «Gaussianos». Esta clase de polinomios nos permite obtener una aritmética exacta, así todos los errores pueden ser «eliminados», debido al uso de los métodos de computación algebraica [TRE 92]. Hasta ahora, sabemos que el cálculo de las raíces polinomiales es una herramienta importante en gran parte del «software» matemático, teniendo muchas aplicaciones en diferentes áreas. También se sabe que no existe una fórmula que nos permite hallar los ceros de polinomios con grado $n > 4$; por tanto necesitamos de alguna técnica para poder encontrar tales ceros, describiremos algunos de estos métodos.

Definición 1.1. *Enumerar ceros de un polinomio es saber cuantos ceros tiene una determinada región (puede ser degenerada) cerrada.*

En las definiciones anteriores, aritmética exacta es necesaria para que podamos aislar y enumerar ceros. Cabe indicar que esta aritmética no conduce generalmente a encontrar los ceros exactamente, esto nos lleva a dar a siguiente

Definición 1.2. *Calcular ceros de un polinomio es aproximar a la raíz deseada por el usuario, esto es $|w - w_*| < \epsilon$, donde w es la raíz de $p(z)$ (es decir $p(w) = 0$), w_* es la raíz aproximada a w y $\epsilon > 0$ tan pequeño como se desee.*

2. Enumeración de raíces

Presentamos en esta sección dos resultados que permiten la enumeración de ceros de polinomios en regiones del plano complejo.

2.1 Principio del argumento

El principio del argumento es una de las herramientas más usadas para contar los ceros de una función analítica (en particular de un polinomio), en el interior de una región cerrada. Presentaremos aquí una prueba que por ser tan elemental, merece su atención.

Teorema 2.1 (Principio del argumento). *Sean C una curva de Jordan simple, cerrada, y $p(z) \neq 0$, en C , definido en (1). Sea $\Delta_C \operatorname{Arg}(p(z))$ la variación en la función continua $\operatorname{Arg}(p(z))$, cuando z recorre C en el sentido anti-horario.*

Entonces el número de ceros de $p(z)$ dentro de C , contando sus multiplicidades, es dado por:

$$N = \frac{1}{2\pi} \Delta_C \operatorname{Arg}(p(z)). \quad (2)$$

Es decir, N es el número de vueltas que la imagen de $p(z)$ da alrededor del origen cuando z recorre C en el sentido anti-horario.

Prueba: Sean w_1, w_2, \dots, w_n los ceros de (1) y consideremos w_1, w_2, \dots, w_p los ceros en el interior de C y $w_{p+1}, w_{p+2}, \dots, w_n$ los ceros en el exterior de C , entonces podemos escribir (1) de la siguiente forma:

$$p(z) = a_n (z - w_1) (z - w_2) \dots (z - w_p) (z - w_{p+1}) \dots (z - w_n)$$

$$\Rightarrow \operatorname{Arg}(p(z)) = \operatorname{Arg}(a_n) + \sum_{i=1}^p \operatorname{Arg}(z - w_i) + \sum_{i=p+1}^n \operatorname{Arg}(z - w_i)$$

Como el punto z describe C en el sentido anti-horario, entonces $\operatorname{Arg}(z - w_i)$ aumenta 2π cuando $1 \leq i \leq p$, pero tiene una variación total nula cuando $p < j \leq n$ (ver fig. 1). Este hecho nos lleva a (2). \square

También por el Teorema del Residuo (ver [DET 69]) (2) se puede escribir

$$N = \frac{1}{2\pi i} \int_C \left[p'(z) / p(z) \right] dz$$

donde C también debe ser una curva regular.

2.2 Teorema de Sturm

Los resultados aquí presentados permiten contar el número de ceros de polinomios complejos en diferentes regiones del plano. La búsqueda de métodos efectivos, hace que sea necesaria la definición de la Sucesión de Sturm e Índices de Cauchy. Como consecuencia del Teorema de Sturm, tenemos el resultado que da el número de ceros de un polinomio real en un intervalo.

Para cualquier función argumento, tenemos que $\tan(p(z)) = \frac{\operatorname{Im}(p(z))}{\operatorname{Re}(p(z))}$. Las variaciones en $\operatorname{Arg}(p(z))$ pueden ser obtenidas contando los saltos en la función $\frac{\operatorname{Im}(p(z))}{\operatorname{Re}(p(z))}$ cuando z recorre C . Cuando $p(z)$ cruza el eje imaginario en el sentido

anti-horario, $\tan(p(z)) = \frac{\operatorname{Im}(p(z))}{\operatorname{Re}(p(z))}$ salta de ∞ a $-\infty$ y si este cruzamiento fuera en el sentido horario, el salto es de $-\infty$ a ∞ . El conteo de estos saltos puede ser hecha, usando el concepto de Índice de Cauchy.

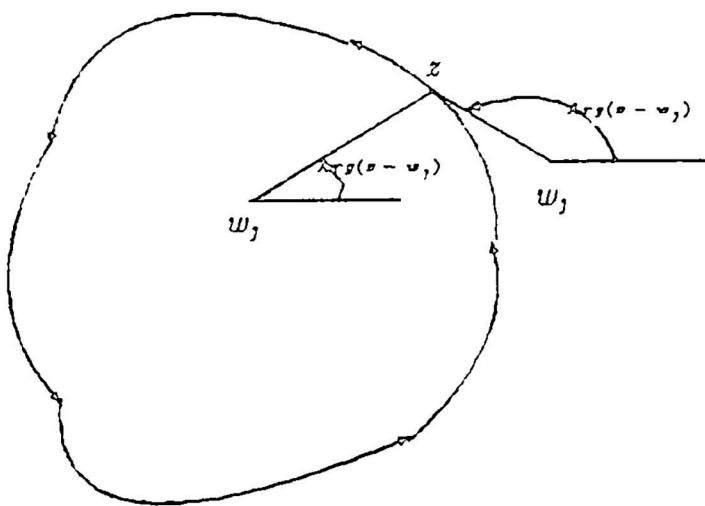


Figura 1. Principio del argumento.

Definición 2.1 (Índice de Cauchy). Sea $\frac{f(x)}{g(x)}$ una función racional en un intervalo $[\alpha, \beta] \subset \mathbb{R}$. El **Índice de Cauchy**, denotado por $I_{\alpha}^{\beta} \left(\frac{f(x)}{g(x)} \right)$ es dado por la diferencia entre el número de puntos en $[\alpha, \beta]$ donde $\frac{f(x)}{g(x)}$ salta de $-\infty$ a ∞ y el número de puntos donde $\frac{f(x)}{g(x)}$ salta de ∞ a $-\infty$.

Establecemos la relación entre el Índice de Cauchy y el Principio del Argumento por el siguiente

Teorema 2.2. Si $C \{(t, z) / z = z(t), t \in [\alpha, \beta]\}$ es una curva simple, cerrada y $p(z)$ un polinomio definido como (1) sobre C , entonces:

$$\Delta_C \operatorname{Arg}(p/z) = -\pi I_{\alpha}^{\beta} \left(\frac{\operatorname{Im}(p(z))}{\operatorname{Re}(p(z))} \right) \quad (3)$$

La prueba de este Teorema puede ser vista en [HEN 76].

En el caso particular donde C es un polígono, entonces podemos escribir

$$\Delta_C \operatorname{Arg}(p(z)) = -\pi \sum_{i=1}^m I_0^l \left(\frac{\operatorname{Im}(p_i(z))}{\operatorname{Re}(p_i(z))} \right) \quad (4)$$

donde m es el número de lados de C e l es la longitud del lado i , y p_i es la parametrización del polinomio sobre el lado i .

Ahora, usando los teoremas 2.1 e 2.2, podemos concluir que el número de ceros polinomiales dentro de un rectángulo son obtenidos por:

$$\Delta_C \operatorname{Arg}(p(z)) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^m I_0^l \left(\frac{\operatorname{Im}(p_i(z))}{\operatorname{Re}(p_i(z))} \right) \quad (5)$$

Observamos que aún es complicado enumerar los ceros polinomiales usando los Índices de Cauchy por la relación (5). A partir de ahora, introducimos la Sucesión de Sturm, que nos permitirá facilitar aún más el trabajo computacional.

Definición 2.2 (Sucesión de Sturm). Una sucesión finita $\{f_0, f_1, \dots, f_m\}$ de polinomios reales, es llamada una **Sucesión de Sturm** asociada con el polinomio real $p(x)$ (que solo admite raíces simples) para el intervalo $[\alpha, \beta]$ si satisface las propiedades siguientes:

- (i) $f_0(\alpha) \neq 0, \quad f_0(\beta) \neq 0;$
- (ii) Si $f_k(\xi) = 0$, donde $1 \leq k \leq m-1$ e $\alpha \leq \xi \leq \beta$ entonces $f_{k-1}(\xi) f_{k+1}(\xi) < 0$ y
- (iii) $f_m(x) = \text{constante} \neq 0$ para $\alpha \leq x \leq \beta.$

Definición 2.3. Sea $f_0(x), f_1(x), \dots, f_m(x)$ una Sucesión de Sturm en $[\alpha, \beta]$, donde $\alpha < \beta$ y sea $x_0 \in [\alpha, \beta]$ con $f_0(x_0) \neq 0$. Definimos $V(x_0)$ como el número de variaciones de signos de $f_0(x_0), f_1(x_0), \dots, f_m(x_0)$, donde los ceros son ignorados.

Si $\alpha \in \mathbb{R}$, entonces $V(\alpha)$ es definido como $V(\alpha + \epsilon)$ donde ϵ es tal que $\forall k = 0, 1, \dots, m, f_k(x)$ no se anula en $\langle \alpha, \alpha + \epsilon \rangle$, similarmente para $\beta \in \mathbb{R}$. Si $\alpha = -\infty$, entonces $V(\alpha)$ es definida como el número de variaciones de signos de $\lim_{x \rightarrow -\infty} f_k(x)$ y de forma similar para $V(\beta)$ cuando $\beta = \infty$.

Haciendo uso de las definiciones (2.1), (2.2) y (2.3) se prueba el siguiente:

Teorema 2.3 (Teorema de Sturm). Sea $f_0(x), f_1(x), \dots, f_m(x)$ una Sucesión de Sturm, asociada a $p(x)$ en $[\alpha, \beta]$, donde $\alpha < \beta$ y sea $V(x)$ el número de variación de signos a lo largo de esta Sucesión en el punto x .

Entonces

$$I_{\alpha}^{\beta} \left(\frac{f_1(x)}{f_0(x)} \right) = V(\alpha) - V(\beta). \quad (6)$$

Prueba: Vea [HEN 76]

La relación (4) puede ahora ser reescrita y tenemos que el número de ceros de $p(z)$ en el interior de un rectángulo (ver próxima sección) es dado por

$$N = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^4 (V(l_i) - V(0)), \quad (7)$$

donde l_i es la longitud del lado i .

Damos el siguiente corolario que es una consecuencia del Teorema anterior, muchas veces conocido como el Teorema de Sturm, y que da un modo de calcular el número de ceros reales de un polinomio real en un intervalo.

Corolario 2.1. *Sea $p(x)$ un polinomio real definido en el intervalo $[\alpha, \beta]$, con $\alpha < \beta$, y $f_0(x), f_1(x), \dots, f_m(x)$ una Sucesión de Sturm asociada a $p(x)$ con $f_0(x) = p(x), f_1(x) = p'(x)$, entonces el número m de ceros de $p(x)$ en $[\alpha, \beta]$ es dado por*

$$m = V(\alpha) - V(\beta).$$

Por tanto la fórmula (7), como el resultado del corolario anterior nos dan un método computacionalmente posible para la enumeración de raíces polinomiales, desde que sea efectivo la determinación de una Sucesión de Sturm.

Ahora damos un resultado en esa dirección donde una Sucesión de Sturm puede ser generada por el siguiente

Teorema 2.4. *Dado el polinomio $p(x)$ real libre de cuadrados en \mathbb{R} no nulo en $[\alpha, \beta]$ con $\alpha < \beta$. Entonces la Sucesión*

$$(a) f_0(x) = p(x);$$

$$(b) f_1(x) = p'(x) \text{ y}$$

$$(c) f_k(x) = -\text{resto} \left(\frac{f_{k-2}(x)}{f_{k-1}(x)} \right), \quad k = 2, 3, \dots, m$$

forma una Sucesión de Sturm, donde el “resto” significa el residuo de la división de un polinomio $q_1(x)$ por otro $q_2(x)$.

Prueba:

Como $f_k(x) = -resto \left(\frac{f_{k-2}(x)}{f_{k-1}(x)} \right)$ entonces existe un polinomio $q_{k-1}(x)$ tal que

$$f_{k-2}(x) = f_{k-1}(x)q_{k-1}(x) - f_k(x), \quad \forall \quad k = 2, 3, \dots, m \quad (**)$$

donde $\deg(q_{k-1}(x)) = \deg(f_{k-2}(x)) - \deg(f_{k-1}(x)) > 0$. Sabemos que $f_m(x) = Bg(x)$ donde B es una constante y $g(x)$ es el máximo divisor común de $f_0(x)$ y $f_1(x)$. Como p es libre de cuadrados, tenemos que $g(x) = \text{constante} \neq 0 \Rightarrow f_m(x) = \text{constante} \neq 0$. Si $f_{k-1}(\xi) = 0$, para $0 < k < m$, entonces de $(**)$ tenemos $f_{k-2}(\xi) = -f_k(\xi)$ de aquí $f_{k-2}(\xi) f_k(\xi) < 0$.

Si

$$f_{k-2}(\xi) = f_k(\xi) = 0 \quad (***)$$

entonces, tenemos

$$\begin{aligned} f_{k-1}(\xi) &= q_k(\xi) f_k(\xi) - f_{k+1}(\xi) \Rightarrow f_{k+1}(\xi) = 0 \\ f_k(\xi) &= q_{k+1}(\xi) f_{k+1}(\xi) - f_{k+2}(\xi) \Rightarrow f_{k+2}(\xi) = 0 \\ &\dots \\ f_{m-2}(\xi) &= q_{m-1}(\xi) f_{m-1}(\xi) - f_m(\xi) \Rightarrow f_m(\xi) = 0 \end{aligned}$$

esto es una contradicción.

Observación 2.1. *En general, el teorema anterior también se satisface para cualquier polinomio dados $f_1(x)$ y $f_2(x)$ no nulos, que no tienen raíces comunes, y los polinomios f_3, \dots, f_m definidos por (c), que es conocido como el **algoritmo euclíadiano** (cálculo del máximo común divisor).*

Ejemplo 2.1. Separar las raíces de la ecuación

$$p(x) = x^3 - 3x^2 - 2x + 5 = 0 \quad (*v)$$

En este caso tenemos

$$f_0(x) = p(x)$$

$$f_1(x) = p'(x) = 3x^2 - 6x - 2$$

$$f_2(x) = \frac{10}{3}x - \frac{13}{3}$$

$$f_3(x) = \frac{473}{100}$$

Ahora aplicamos el Teorema de Sturm en el intervalo $[\alpha, \beta] = [-2, 4]$.

Para $x = -2$ e $x = 4$, los polinomios generados por la sucesión de Sturm del polinomio $(*)^v$ toman los signos siguientes mostrada en la tabla:

x	$f_0(x)$	$f_1(x)$	$f_2(x)$	$f_3(x)$	Cambio de signos
-2	-	+	-	+	3
4	+	+	-	+	0

El número de raíces en el intervalo $[-2, 4]$ es $V(-2) - V(4) = 3$.

Observación 2.2. Observe que si $f(x) = p(x)$ no es libre de cuadrado entonces $f_m(x) = \text{mdc}(f(x), f'(x)) \neq \text{constante}$, por lo tanto no satisface la parte (ii) de la definición (2.2), pero $\frac{f_k(x)}{f_m(x)} \quad \forall k = 0, 1, 2, \dots, m$, será una sucesión de Sturm.

Ejemplo 2.2. Mostramos un ejemplo para encontrar el número de raíces reales del polinomio

$$p(x) = x^6 + 4x^5 + 4x^4 - x^2 - 4x - 4$$

Aquí hacemos lo siguiente $f_0(x) = p(x) = (x^2 + 1)(x^2 - 1)(x + 2)^2$

$$f_1(x) = p'(x) = 6x^5 + 20x^4 + 16x^3 - 2x - 4 = (6x^4 + 8x^3 - 2)(x + 2)$$

para generar las otras $f_k(x)$ hacemos uso de $f_k(x) = \text{-resto} \left(\frac{f_{k-2}(x)}{f_{k-1}(x)} \right)$, $k = 2, 3, \dots, m$, entonces tenemos

$$f_2(x) = 4x^4 + 8x^3 + 3x^2 + 14x + 16$$

$$f_3(x) = x^3 + 6x^2 + 12x + 8$$

$$f_4(x) = -17x^2 - 58x - 48$$

$$f_5(x) = -x - 2$$

donde los coeficientes se han hecho enteros por la multiplicación apropiada de una constante positiva.

Observe también que la sucesión $\{f_0(x), f_1(x), \dots, f_5(x)\}$ no forma una sucesión de Sturm, pues $f_0(x)$ no es libre de cuadrados y $f_5(x) = -x - 2 = \text{mdc}(f_0(x), f_1(x))$ salvo el signo, pero $\left\{ \frac{f_k(x)}{f_5(x)} \right\} \quad \forall k = 0, \dots, 5$ es una sucesión de Sturm, luego tenemos

$$\begin{aligned}
 f f_0(x) &= -(x^2 + 1)(x^2 - 1)(x + 2) \\
 f f_1(x) &= -(6x^4 + 8x^3 - 2) \\
 f f_2(x) &= -(4x^3 + 3x + 8) \\
 f f_3(x) &= -(x^2 + 4x + 4) \\
 f f_4(x) &= 17x + 24 \\
 f f_5(x) &= 1
 \end{aligned}$$

	$-\infty$	$-\frac{24}{17}$	-1	0	1	∞
$f f_0(x)$	-	-	0	+	0	-
$f f_1(x)$	+	+	+	+	-	-
$f f_2(x)$	-	+	-	-	-	-
$f f_3(x)$	+	-	-	-	-	-
$f f_4(x)$	+	0	+	+	+	+
$f f_5(x)$	-	+	+	+	+	+
Número de cambio de signos	4	3	2	2	1	1

Luego, tenemos tres raíces distintas reales, dos raíces negativas y una raíz positiva. Aún que -1 y 1 son ceros, el ejemplo muestra que existen dos ceros distintos en $(-\infty, -1]$ y tres en $(-\infty, 1]$. El punto $-\frac{24}{17}$ ilustra el caso cuando un $f_k(x) = 0$.

Usando la sucesión de Sturm podemos enumerar los ceros polinomiales en el plano complejo en regiones no acotadas.

El siguiente teorema establece:

Teorema 2.5 (Teorema de Routh). Sea $p(z) = \lambda(z) + i\delta(z)$, donde $\lambda(z) = \operatorname{Re}(p(z))$ e $\delta(z) = \operatorname{Im}(p(z))$ son polinomios reales, con $\delta(z) \neq 0$, y que no tenga ceros reales, n_1 ceros (contando las multiplicidades) en el semiplano superior del plano complejo \mathbb{C} y n_2 ceros (contando las multiplicidades) en el semi-plano inferior del plano \mathbb{C} .

Sea $V(z)$ la variación de signos obtenida en el punto z para la sucesión de Sturm iniciada con $\lambda(z)$ y $\delta(z)$, evaluándose $z \in \mathbb{R}$, entonces para $n = \operatorname{grad}(p(z))$, se tiene

$$n1 = \frac{1}{2}(n + V(\infty) - V(-\infty)) \quad y$$

$$n2 = \frac{1}{2}(n - V(\infty) + V(-\infty)).$$

Prueba Vea ([MAR 89])

Ejemplo 2.3. $p(z) = z^5 + 2z^3 + (3 + i)z^2 + (-63 + i)$, entonces $\lambda(z) = Re(p(z)) = z^5 + 2z^3 + 3z^2 - 63$ e $\delta(z) = Im(p(z)) = z^2 + 1 \neq 0$, luego la Sucesión de Sturm tiene la forma

$$\begin{aligned} f_0(z) &= \lambda(z) \\ f_1(z) &= \delta(z) \\ f_2(z) &= z + 66 \\ f_3(z) &= -4357 = \text{constante} \neq 0. \end{aligned}$$

Ahora $V(\infty) = 1$ y $V(-\infty) = 2$. Aplicando el teorema (2.5) obtenemos:

$$n1 = \frac{1}{2}(n + V(\infty) - V(-\infty)) = \frac{1}{2}(5 + 1 - 2) = 2$$

$$n2 = \frac{1}{2}(n - V(\infty) + V(-\infty)) = \frac{1}{2}(5 - 1 + 2) = 3$$

aquí tenemos $n1 = 2$ ceros en el semi-plano superior y $n2 = 3$ ceros en el semi-plano inferior:

Para determinar el número de ceros de $p(z)$ en el semi-plano derecho, hacemos la transformación $z \leftarrow iz$, esto equivale a encontrar el número de ceros que $p(z)$ tiene en el semi-plano inferior del plano \mathbb{C} .

Ejemplo 2.4. De nuestro ejemplo (2.3) tenemos:

$$p(iz) = iz^5 - 2iz^3 + (-3 - i)z^2 + (-63 + i)$$

los ceros de $p(iz)$ equivalen a obtener los ceros de

$$\hat{p}(z) = \frac{1}{i}p(iz), \text{ entonces:}$$

$$\hat{p}(z) = z^5 - 2z^3 + (-1 + 3i)z^2 + (1 + 63i)$$

de aquí:

$$f_0(z) = \operatorname{Re}(\hat{p}(z)) = z^5 - 2z^3 - z^2 + 1$$

$$f_1(z) = \operatorname{Im}(\hat{p}(z)) = 3z^2 + 63$$

$$f_2(z) = -483z - 22$$

$$f_3(z) = -\frac{4899553}{77763} = \text{constante} \neq 0.$$

$$\text{Ahora, } V(\infty) = 1 \quad \text{e} \quad V(-\infty) = 2.$$

Aplicando el Teorema (2.4), obtenemos que el número de ceros en el semi-plano inferior:

$$n_2 = \frac{1}{2}(n - V(\infty) + V(-\infty)) = \frac{1}{2}(5 - 1 + 2) = 3,$$

esto equivale a decir que tenemos $n_2 = 3$ ceros en el semi-plano derecho del plano \mathbb{C} del polinomio $p(z)$.

El gráfico (2) muestra donde se encuentran las raíces del polinomio del ejemplo (2.4):

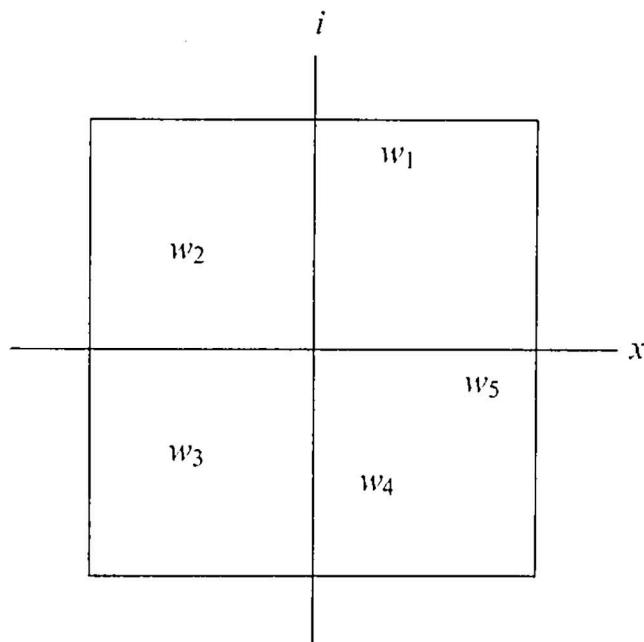


Figura 2: Localización de los ceros del polinomio del ejemplo (2.4).

REFERENCIAS

- 1) [BAA 88] **Baase, S.** *Computer Algorithms. Introduction to Design and Analysis.* Addison-Wesley Publishing Company. 1988.
- 2) [BEA 94] **Beauzamy, B.**, «*Finding the Roots of Polynomial Equations: An algorithm with linear command*», *Institute de Calcul Mathématique. Paris* 1994.
- 3) [BUC 83] **Buchberger B., Collins G. E. and Leos R.**, «*Computer Algebra Symbolic and Algebraic Computation*» Springer-Verlag, 1983.
- 4) [CAM 94a] **Camargo, M. A. O., Trevisan, V. and Claudio, D. M.**, *A Symbolic Algorithm to Isolate Complex Polynomial Zeros using Sturm Sequences*, Universidade Federal Rio Grande do Sul, January, 1994. Pre print.
- 5) [CAM 94b] **Camargo, M. A. O.**, *Algoritmos algebraicos para enumerar e isolar zeros polinomiais complexos*, Tese, Universidade Federal Rio Grande do Sul, CPGCC Maio, 1994.
- 6) [COL 77] **Collins, G. E.** «*Infallible calculation of polynomial zeros to specified precision*», *Mathematical software edited by J Rice*, 1977, pp 35-68
- 7) [COL 89] **Collins, G.E. and Johnson, J. R.** «*Quantifier elimination and sign variation method for real root isolation*», *Proc. of 1989 ACM-SYMSAC-OREGON*, pp. 264-271.
- 8) [COL 92] **Collins, G.E. and Krandick W.**, «*An efficient algorithm for infallible polynomial complex root isolation*», *Proceeding of Issac USA*, 1992, pp 189-1994.
- 9) [DAV 88] **Davenport, J. H.**, *Computer algebra. Systems and algorithms for algebraic computation*. Academic press (1988).
- 10) [DET 69] **Dettman, J. W.**, *Applied complex variables*, The Macmillan Company Collier - Macmillan. Canada, 1969.
- 11) [HEN 76] **Henrici, Peter.** *Applied and computational complex analysis. Volume I* John Wiley and Sons, 1976.
- 12) [KUN 81] **Knuth, Donald E.** *The art of computer programming. Volume II* Addison-Wesley Publishing Company, 1981.
- 13) [MAR 89] **Marden, Morris.** *Geometry of polynomials*. American Mathematical Society Providence, Rhode Island Mathematical Surveys and Monographs, number 3., 1989.
- 14) [MIG 91] **Mignote, M.**, «*On the Product of the Largest Roots of a Polynomial*», 1991, pp. 249-260.
- 15) [PIN 76] **Pinkert, James R.** «*An Exact Method for Finding of Complex Polynomial* Acm Transactions on Mathematic Applied», December 1976, pp 351-363
- 16) [RAL 65] **Ralston, Anthony.** *A First Course in Numerical Analysis* McGraw-Hill Book Company 1965.

17) [SAG 60] **Sagastume, A. E. y Fernández G.**, *Algebra y Cálculo Numérico*. Editorial Kapeluzs. Argentina, 1960.

18) [TRE 92] **Trevisan, V.** *Computação Algébrica e Simbólica. Reuniões em Matemática Aplicada*, SBMAC, 1992.

19) [WAL 22] **Walsh, J. L.** «*On The Location of the Roots of Certain Types of Polynomials*», *Trans A.M.S.* 12, December 1922, pp. 163-180.

20) [WIL 78] **Wilf, H.**, «*A Global Bisection Algorithm for Computing the Zeros of Polynomials in the Complex Plane*», *Journal of the ACM*, 25(3) July, 1978, pp. 415-420.

21) [ZEL 91] **Zelheb, E.** «*On the Largest of Polynomial Zeros*». *IEEE Transactions on Circuits and Systems*, Vol. 38 Nº 3, March 1991, pp. 333-336.

Un resultado tipo Lyapunov en cálculo de variaciones¹

Verónica Briceño V. y Fabián Flores Bazán (*)

1. Introducción

El cálculo de variaciones se ha ido desarrollando a lo largo de estos últimos tres siglos; es probable que sus inicios fueran en 1696, cuando Johann Bernoulli plantea el problema de la Braquistócrona.

El problema de encontrar puntos en los cuales una o varias funciones alcancen su valor mínimo o máximo, es un problema conocido; en Cálculo de Variaciones, el principal interés es más extenso, deseamos encontrar funcionales integrales que admitan puntos de mínimo, es decir, aquellos puntos donde la integral alcanza su valor mínimo. Más precisamente, nos interesa que el problema:

$$\min_{z \in \mathcal{C}} J(z) \quad (P)$$

admita solución.

¹ Trabajo basado en el material de investigación financiado parcialmente por CONICYT-Chile a través del Proyecto FONDECYT 197-0931 y FONDAP-Matemáticas Aplicadas (Optimización).

(*) Universidad de Concepción - Departamento de Ingeniería Matemática, Casilla 4009, Concepción - Chile.

La importancia del Cálculo de Variaciones, se debe a la aplicación que puede hacerse en una amplia gama de problemas de la matemática pura. además, dentro de distintas ramas de la Ciencia y de la Ingeniería, muchos problemas se dejan modelar como un problema de minimización.

Vamos a iniciar nuestra discusión presentando en la Sección 2 algunos conceptos básicos, que nos serán de utilidad en nuestro trabajo.

Mostraremos en la Sección 3 el Método Directo que establece la existencia de solución para problemas cuando la funcional es secuencialmente semicontinua inferiormente (s.s.c.i.). Citamos el artículo [F12] para una descripción más detallada de este método, aplicado a problemas unidimensionales dependientes de la derivada de primer orden. De la demostración del teorema se obtiene la descripción del método. Dado que en nuestro trabajo usaremos un espacio de Sobolev, tenemos que la condición de s.c.i. es equivalente a pedir que la funcional sea convexa en la variable de derivada de orden superior [Gi, Mo]. En el caso que la función integrando no cumpla esta propiedad, no podemos asegurar la existencia de mínimos; pero es posible encontrar una clase de funciones integrando, no necesariamente convexa, de modo que se pueda obtener la existencia; pero debemos suponer que las funcionales son del tipo que se deja representar como la suma de dos integrales: una dependiente de las derivadas de orden superior (la parte no convexa), y la otra dependiente de la función estado.

Es por esto que en la Sección 4 enunciaremos el Teorema de Lyapunov [Ly]. Mostraremos además las variantes más importantes [Ce, Br], que se utilizan para probar resultados de existencias de mínimos de funcionales integrales que no son s.c.i. débilmente y tampoco regulares. Nuestro objetivo principal es mostrar cómo este teorema ha sido aplicado en problemas de mínimos no convexos en el contexto del Cálculo de Variaciones.

Finalmente, en la Sección 5 presentamos una nueva variante que es adecuada para tratar problemas que involucran ecuaciones hiperbólicas. Esta versión nos permite tratar funcionales integrales no convexas, que dependen de la derivada mixta de orden dos, además de la variable estado, esto es, para la funcional:

$$J(z) = g(t, x, z(t, x)) + h(z_{,t}(t, x)) + f(t, x, z_t(t, x)) \quad (1.1)$$

probaremos bajo condiciones de Darboux sobre tres lados del rectángulo y bajo ciertas hipótesis a precisar, la existencia de solución para el problema (P) . Referimos a [Bri] para ver mayores detalles. Un problema similar fue estudiado en [B-F] y problemas de mínimos gobernados por ecuaciones diferenciales parciales hiperbólicas más generales fueron tratados en [Su2, Ra2].

2. Resultados preliminares

Mostraremos a continuación algunos conceptos, teoremas y proposiciones que usaremos en nuestro trabajo.

Definición 2.1. Consideremos $F: X \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$.

- Decimos que F es una *multifunción* si $\forall x \in X$ se asocia el subconjunto (eventualmente vacío) $F(x) \subset \mathbb{R}^n$.
- Se dice que es *medible* si para cada abierto $C \subset \mathbb{R}^n$ el conjunto:

$$\{x \in X : F(x) \cap C \neq \emptyset\}$$

es medible (de Lebesgue).

- La función $f: X \rightarrow \mathbb{R}^n$ se llama *selección* de F si:

$$f(x) \in F(x), \quad \forall x \in X.$$

Teorema 2.2. (Teorema de Selección Medible) [Cl, Cap. 3, Sec. 1, Teo. 3.1.1]

Sea F una multifunción medible y cerrada en S , tal que $F(x) \neq \emptyset$, $\forall x \in S$.

Entonces existe una función medible:

$$f: S \rightarrow \mathbb{R}^n \text{ tal que } f(x) \in F(x), \quad \forall x \in S.$$

Proposición 2.3. [Cl, Cap. 3, Sec. 1, Prop. 3.1.2]

Sea F una multifunción medible y cerrada, sea $g: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ tal que:

- $\forall x \in S$, la función $y \rightarrow g(x, y)$ es continua, y
- $\forall y \in \mathbb{R}^n$, la función $x \rightarrow g(x, y)$ es medible sobre S .

Entonces, la multifunción $G: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ definida por:

$$G(x) = \{y \in F(x) : g(x, y) = 0\}$$

es medible y cerrada en S .

Definición 2.4. Si consideramos Ω un rectángulo en \mathbb{R}^2 , definimos el espacio de Sobolev $W^{*,p}(\Omega)$ que consiste de todas las funciones en $L^p(\Omega)$ tales que todas (y sólo) las derivadas parciales mixtas, en el sentido de las distribuciones, hasta el orden 2, de las variables independientes, están en $L^p(\Omega)$ esto es

$$W^{*,p}(\Omega) \doteq \left\{ \varepsilon \in L^p(\Omega) : \varepsilon_t, \varepsilon_\nu, \varepsilon_{tt}, \varepsilon_{t\nu}, \varepsilon_{\nu\nu} \in L^p(\Omega) \right\}$$

Sobre este espacio definimos la norma:

$$\|z\|_{*,p} \doteq \|z\|_p + \|z_t\|_p + \|z_x\|_p + \|z_{tx}\|_p.$$

Con esta norma el espacio $W^{*,p}(\Omega)$ es un espacio de Banach, donde $\|\cdot\|_p$ denota la norma en $L^p(\Omega)$. Es claro que, para cualquier rectángulo Ω , se tiene que: $W^{2,p}(\Omega) \subset W^{*,p}(\Omega)$. Referirse a [Su1], para un estudio de este espacio.

3. Método directo en cálculo de variaciones

Este método es usado al abordar la teoría de existencia, que fue iniciada por Hilbert en 1900, y desarrollada por Tonelli [To], Mc. Shane y otros.

Consideremos K un subconjunto de un espacio topológico X . El siguiente teorema nos entrega las condiciones suficientes para asegurar que una funcional alcance su mínimo.

Teorema 3.1. *Dado un conjunto no vacío, y una función $J: K \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ acotada por abajo, tal que:*

- (i) *K es secuencialmente compacto,*
- (ii) *J es s.s.c.i. sobre K ,*

entonces $\exists x_ \in K$ tal que: $J(x_*) \leq J(x), \forall x \in K$.*

La idea que desarrolla el Método Directo en el Cálculo de Variaciones para demostrar la existencia de mínimo, puede resumirse de la siguiente manera:

1. La integral a minimizar es acotada por abajo; por consiguiente, el ínfimo es finito, y por tanto, existe una sucesión minimizante.
2. Demostración de la existencia de una función límite para esta sucesión; en realidad, basta demostrar que sea para una subsucesión de ella.
3. Demostración de la s.s.c.i. de la funcional en la función límite.

Usualmente, se trabaja con espacios de Sobolev y se usa la topología débil. Se prueba (ver [Gi, Mo]) que la condición (ii) dada en el teorema anterior, es equivalente a decir que la función h es convexa (ver (1.1)).

4. El teorema de Lyapunov: Algunas variantes

Nuestro interés es estudiar funciones no convexas en la variable donde la derivada sea de orden superior, por tanto, no podremos aplicar el Método Directo,

de aquí la importancia de usar el Teorema de Lyapunov [Ly], presentado en 1940, el cual ha sido aplicado en problemas de mínimos no convexos en el contexto del Cálculo de Variaciones, y que nos será útil para probar existencia de mínimos de funcionales integrales que no son s.s.c.i., y tampoco diferenciables.

Teorema 4.1 (Teorema de Lyapunov) [Ly]

El rango de una medida vectorial finita no atómica es un conjunto convexo y cerrado.

Ejemplo:

$$\mu(A) = \int_A f \, dv, \quad \mu \ll v, \quad f \in L^1, \quad A \subset \mathbb{R}^n$$

En 1963, L. W. Neystadt [Ne], fue el primero en utilizar los resultados de Lyapunov en teoremas de existencia para problemas de control óptimo.

Desde 1972 a 1980, L. Cesari (referirse al libro [Ce]), generaliza el trabajo de Neustadt a todas las formas de problemas de control gobernados por ecuaciones diferenciales ordinarias. La siguiente versión del Teorema de Lyapunov es debido a L. Cesari [Ce, Cap. 16], antes veamos algunas notaciones.

Consideramos $A \subset \mathbb{R}^n$ un conjunto medible, con medida de Lebesgue finita en \mathbb{R}^n ; en realidad, para las consideraciones siguientes A será un intervalo $[a, b]$ en \mathbb{R} .

Sean, además $f^{(j)}(t) = (f_1^{(j)}, \dots, f_n^{(j)}), t \in A, j = 1, \dots, h$, funciones vectoriales dadas, cuyas componentes son integrables en A . Consideramos particiones arbitrarias E_1, \dots, E_h de A en subconjuntos medibles y disjuntos, es decir, $E_u \cap E_v = \emptyset, u, v = 1, \dots, h; u \neq v$ y tal que $A = \bigcup_u E_u$. Entonces

$$\begin{aligned} \mu &= \mu(E_1, \dots, E_h) \\ &= \int_{E_1} f^{(1)}(t) \, dt + \dots + \int_{E_h} f^{(h)}(t) \, dt, \end{aligned}$$

define un conjunto K de \mathbb{R}^n cuando la partición E_1, \dots, E_h describe todas las posibles particiones de A en subconjuntos medibles E_j de A para $j = 1, \dots, h$.

Análogamente consideramos funciones pesos medibles arbitrarias p_j , con $0 \leq p_j(t) \leq 1; j = 1, \dots, h$; y $p_1(t) + \dots + p_h(t) = 1, t \in A$.

Entonces,

$$\begin{aligned} v &= \mu(p_1, \dots, p_h) \\ &= \int_{E_1} f^{(1)}(t) dt + \dots + \int_{E_h} f^{(h)}(t) dt, \end{aligned}$$

define un conjunto K de R^n cuando p_1, \dots, p_h describe todos los posibles sistemas de funciones medibles $p_j(t)$, $t \in A$, $0 \leq p_j(t) \leq 1$; $j = 1, \dots, h$; $p_1(t) + \dots + p_h(t) = 1$.

Teorema 4.2. [Ce, Cap. 16, Sec. 1, Teo. 16.1.v]

Los subconjuntos H y K de R^n son convexos, compactos y $H = K$.

Observación 4.3. Así del teorema anterior, se tiene que:

Dadas $f^{(j)}(t) = (f_1^{(j)}, \dots, f_n^{(j)})$, $j = 1, \dots, h$, funciones medibles de R^n a R^n ; y funciones peso p_j con $0 \leq p_j(t) \leq 1$; para $j = 1, \dots, h$, y tales que $p_1(t) + \dots + p_h(t) = 1$.

Entonces, existe una partición medible $\{A_1, \dots, A_h\}$ de R^n , tal que:

$$\int_{R^n} \sum_{i=1}^h p_i(t) f^i(t) dt = \sum_{i=1}^h \int_{A_i} f^i(t) dt.$$

En 1993, A. Bressan prueba la siguiente versión del Teorema de Lyapunov, aunque ya una versión similar fue establecida en [A-L].

Teorema 4.4. [Br]

Sean las funciones $f_i \in L^1(R^n)$ donde $f_i: R^n \rightarrow R^n$, y los pesos medibles $p_i: R^n \rightarrow [0, 1]$, $i = 1, \dots, v$, tales que $\sum p_i(x) \equiv 1$, para todo $x \in R^n$. Dado cualquier conjunto finito $\{v_1, \dots, v_k\}$ de vectores no nulos en R^n , existe una partición medible $\{A_1, \dots, A_v\}$ de R^n tal que $\forall j = 1, \dots, k$, se tiene que:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \sum_{i=1}^v p_i(x' + \lambda v_j) f_i(x' + \lambda v_j) d\lambda = \sum_{i=1}^v \int_{x' + \lambda v_j \in A_i} f_i(x' + \lambda v_j) d\lambda$$

para casi todo x' en el hiperplano perpendicular a v_j .

Esta versión permite tratar problemas de minimización no convexos, que involucran ecuaciones hiperbólicas sobre un dominio rectangular, con condiciones de Darboux sobre toda la frontera, como se muestra en [B-F].

En [F11], se presenta una aplicación del Teorema 4.2, a problemas de mínimos con simetría radial, dependientes del Laplaciano.

Otras versiones pueden verse en [C-M, A-M, Ra1]. Pero las distintas variantes que existen no permiten tratar problemas donde la función integrando dependa de la derivada mixta.

5. Un nuevo resultado del tipo Lyapunov

Consideremos $h: R \rightarrow R$ una función boreliano, donde h^{**} denota la función bipolar de h , definida como la función convexa y s.c.i. más grande, pero no mayor que h .

Tenemos entonces la variante del Teorema de Lyapunov. Para una versión más general, referimos a [F-P].

Lema 5.1. *Sea $\mathfrak{R} = [0, T] \times [a, b]$ un rectángulo en R^2 , y v una función medible tal que $(t, x) \mapsto h^{**}(v(t, x))$ está en $L^1(\mathfrak{R})$. Además, sean α, β tales que $-\infty < \alpha < \beta < +\infty$, de modo que:*

$$h^{**}(\xi) < h(\xi), \quad \forall \xi \in [\alpha, \beta]; \quad h^{**}(\alpha) = h(\alpha), \quad h^{**}(\beta) = h(\beta). \quad (5.1)$$

Y sea $E = \{(t, x) \in \mathfrak{R} : \alpha < v(t, x) < \beta\}$ distinto de vacío.

Entonces existe una función medible w que toma valores en $\{\alpha, \beta\}$ para $(t, x) \in E$, que verifica:

$$a) \quad \int_a^b w(t, x) \chi_E(t, x) \, dx = \int_a^b v(t, x) \chi_E(t, x) \, dx;$$

$$b) \quad \int_a^b h(w(t, x)) \chi_E(t, x) \, dx = \int_a^b h^{**}(v(t, x)) \chi_E(t, x) \, dx;$$

además, $\forall x \in [a, b]$ se cumple:

$$c) \quad \int_a^x w(t, s) \chi_E(t, s) \, ds \leq \int_a^x v(t, s) \chi_E(t, s) \, ds, \quad \forall t \in [0, T]$$

Demostración:

Para $t \in [0, T]$ fijo, consideremos la función:

$$\psi(\delta, t) = \int_a^\delta \alpha \chi_E(t, x) \, dx + \int_\delta^b \beta \chi_E(t, x) \, dx - \int_a^b v(t, x) \chi_E(t, x) \, dx.$$

Se tiene que:

$$\psi(\cdot, t) \in C^0([a, b]), \quad y \quad \psi(\delta, \cdot) \text{ es medible.} \quad (5.2)$$

Definimos la multifunción:

$$\begin{aligned} F : [0, T] &\longrightarrow 2^{[a, b]} \\ t &\mapsto F(t) = \{\delta \in [a, b] : \psi(\delta, t) = 0\} \end{aligned}$$

De (5.2), usando la proposición 2.3, se tiene que F es medible y $F(t)$ cerrado; del Teorema del Valor Medio sabemos que $F(t) \neq \emptyset, \forall t \in [0, T]$. Entonces por el Teorema 2.2, existe δ , selección medible de F .

Sea $w: \mathfrak{N} \rightarrow \mathbb{R}$, definida por:

$$w(t, x) = \alpha \chi_{E \cap [0, T] \times [a, \delta(t)]}(t, x) + \beta \chi_{E \cap [0, T] \times [\delta(t), b]}(t, x)$$

Se tiene que w es una función medible. Para probar esto, basta ver que:

$$K \doteq \{(t, x) \in \mathfrak{N} : \delta(t) < x\}$$

es un conjunto medible.

Ahora, la definición de δ , se tiene:

$$\int_a^b \left\{ \alpha \chi_{E \cap [0, T] \times [a, \delta(t)]}(t, x) + \beta \chi_{E \cap [0, T] \times [\delta(t), b]}(t, x) \right\} dx = \int_a^b v(t, x) \chi_E(t, x) dx.$$

Y por tanto, se verifica a).

Por otro lado $\forall \xi \in [\alpha, \beta]$ tenemos que $h^{**}(\xi) = m\xi + c$, para algún m y c . Luego,

$$\begin{aligned} \int_a^b h^{**}(v(t, x)) \chi_E(t, x) dx &= \int_a^b \{mv(t, x) + c\} \chi_E(t, x) dx \\ &= \int_a^b \{mw(t, x) + c\} \chi_E(t, x) dx, \quad \text{por a)} \\ &= \int_a^b h(w(t, x)) \chi_E(t, x) dx, \quad \text{por (5.1).} \end{aligned}$$

Así, se cumple b).

La desigualdad c), se obtiene del siguiente razonamiento:

Fijamos $x \in [a, b]$, sea $t \in [0, T]$, entonces:

$$\forall (t, x) \in \mathfrak{R}, \text{ sea } I = \int_a^b [w(t, s) - v(t, s)] \chi_E(t, s) ds.$$

$$\text{Si } x \leq \delta(t), \text{ entonces } I = \int_a^b [\alpha - v(t, s)] \chi_E(t, s) ds \leq 0.$$

Por otra parte, si $\delta(t) < x \leq b$, entonces

$$\begin{aligned} I &= \int_a^b [w(t, s) - v(t, s)] \chi_E(t, s) ds - \int_x^b [w(t, s) - v(t, s)] \chi_E(t, s) ds \\ &= - \int_x^b [\beta - v(t, s)] \chi_E(t, s) ds \leq 0. \end{aligned}$$

Lo que concluye la demostración.

Observación 5.2. Si en la definición de w y de ψ cambiamos “ α ” por “ β ”, obtenemos los mismos resultados del Lema 5.1, sólo que en c) la desigualdad cambia de sentido.

Observación 5.3. De la demostración anterior se ve que podemos obtener una función w medible, que verifica las condiciones del lema anterior, pero en la otra variable.

Observación 5.4. No puede obtenerse una versión donde $v: \mathfrak{R} \subseteq \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^n$, para $n \geq 2$; esto queda claro al estudiar el caso para $n = 2$, donde consideramos $\mathfrak{R} = E = [0, 1]^2$, la multifunción $\Phi(t, x) = \{\lambda(1, x) : \lambda \in [0, 1]\}$, y sea la función medible $v(t, x) = \frac{1}{2}(1, x)$.

Se prueba que no existe una función medible $w = (w_1, w_2)$, la cual toma valores sobre $\{(0, 0), (1, x)\}$ c.t.p. que verifique las condiciones del lema anterior. Comparar con el ejemplo dado en [A-M].

Lema 5.5. Suponemos que: $\{\xi \in \mathbb{R} : h^{**}(\xi) < h(\xi)\} = \bigcup_i [\alpha_i, \beta_i]$ donde $[\alpha_i, \beta_i]$ son intervalos disjuntos, con $-\infty < \alpha_i < \beta_i < +\infty$, con i variando en un conjunto contable; y, $h^{**}(\alpha_i) = h(\alpha_i)$, $h^{**}(\beta_i) = h(\beta_i)$.

Además, h es tal que verifica la siguiente condición de crecimiento: $h(\xi) \geq c|\xi|^p - k$ donde $c > 0$, $k \in \mathbb{R}$, $1 < p < +\infty$.

Suponiendo que existe $v \in L^p(\mathfrak{R})$, tal que $(t, x) \mapsto h^{**}(v(t, x))$ es $L^1(\mathfrak{R})$, entonces existe $w \in L^p(\mathfrak{R})$ que toma valores en $\bigcup_i \{\alpha_i, \beta_i\}$ sobre:

$$\left\{ (t, x) \in \mathfrak{R} : v(t, x) \in \bigcup_i [\alpha_i, \beta_i] \right\},$$

verificando:

$$(i) \quad \int_a^b w(t, x) dx = \int_a^b v(t, x) dx; \quad (ii) \quad \int_a^b h(w(t, x)) dx = \int_a^b h^{**}(v(t, x)) dx;$$

además, $\forall x \in [a, b]$ se cumple:

$$(iii) \quad \int_a^x w(t, s) ds \leq \int_a^x v(t, s) ds, \quad \forall t \in [0, T]$$

Demostración:

Definamos: $E_i = \{(t, x) \in \mathfrak{R} : \alpha_i \leq v(t, x) \leq \beta_i\}$, $E = \bigcup_i E_i$, $E_o = \mathfrak{R} \setminus E$.

Aplicamos el Lema 5.1 a cada conjunto E_i , se tiene que existen w_i funciones medibles que toman valores sobre $\{\alpha_i, \beta_i\}$, que verifican las condiciones a), b) y c). Sea $w: \mathfrak{R} \rightarrow \mathbb{R}$, tal que:

$$w(t, x) = v(t, x) \chi_{E_o}(t, x) + \sum_i w_i(t, x) \chi_{E_i}(t, x).$$

Se prueba que esta función satisface (i), (ii) y (iii). Además, de la condición de crecimiento se tiene que $w \in L^p(\mathfrak{R})$. \square

En realidad, respecto de las hipótesis del Lema 5.5, la condición de crecimiento sobre la función h implica la existencia de los α_i, β_i con tales propiedades (ver Proposición 5.7).

Problemas de minimización no convexos

A continuación presentamos dos tipos de funcionales, para las cuales probaremos, bajo ciertas hipótesis, que cada una de ellas alcanza su mínimo, por una aplicación directa del Lema 5.5.

El razonamiento será análogo en estos casos, y puede resumirse de la siguiente manera: se inicia considerando el problema de minimización (P^{**}) asociado al problema original (P) , el problema (P^{**}) se obtiene, de reemplazar la función h por

h^{**} en la funcional J , ver (1.1). El problema (P^{**}) es tal que si J^{**} es la funcional asociada al problema (P^{**}) , se tiene

$$J^{**}(z) \leq J(z), \quad \forall z \quad y \quad \min_z J^{**}(z) = J^{**}(\tilde{z}) \in \mathbb{R}$$

Luego, utilizando la variante del Teorema de Lyapunov que demostramos en la sección previa, es decir, el Lema 5.5, se prueba que existe una función \bar{z} que satisface:

$$J(\bar{z}) = J^{**}(\tilde{z}) = \min_z J^{**}(z) \leq \min_z J(z)$$

lo cual implica que \bar{z} es solución del problema (P) .

Usualmente, el problema (P^{**}) se llama problema convexificado.

En nuestro trabajo siguiente, consideramos el rectángulo $\mathfrak{R} = [0, T] \times [a, b]$ en \mathbb{R}^2 ; denotamos \mathcal{L} la álgebra de Lebesgue sobre \mathcal{K} , y $\mathcal{B}(\mathbb{R})$ denotará la álgebra de Borel sobre \mathbb{R} .

Las siguientes proposiciones nos serán útiles en nuestro trabajo posterior.

Proposición 5.6. *Sea z^n una sucesión en \mathcal{Z} , tal que existe $M \in \mathbb{R}^+$ de modo que: $\|z^n\|_p \leq M$. Entonces, existe $z \in \mathcal{Z}$ continua tal que:*

$$\begin{aligned} z^n &\longrightarrow z \quad \text{uniformemente,} & z_t^n &\rightharpoonup z_t \quad \text{en } L^p(\mathcal{K}), & z_x^n &\rightharpoonup z_x \quad \text{en } L^p(\mathcal{K}), \\ z_{tx}^n &\rightharpoonup z_{tx} \quad \text{en } L^p(\mathcal{K}). \end{aligned}$$

Proposición 5.7. *Si $h(\xi) \geq c|\xi|^p - k$, donde $c > 0$, $1 < p < +\infty$, $k \in \mathbb{R}$, entonces $\{\xi \in \mathbb{R} : h^{**}(\xi) < h(\xi)\} = \bigcup_i [\alpha_i, \beta_i]$ donde $[\alpha_i, \beta_i]$ son intervalos disjuntos, con $-\infty < \alpha_i < \beta_i < +\infty$, con i variando en un conjunto contable; y, $h^{**}(\alpha_i) = h(\alpha_i)$, $h^{**}(\beta_i) = h(\beta_i)$.*

Consideremos la siguiente

Hipótesis (H1)

Sea $g: \mathcal{K} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ tal que:

(g₁) g es $\mathcal{L} \times \mathcal{B}(\mathbb{R})$ -medible.

(g₂) $z \mapsto g(t, x, z(t, x))$ es s.c.i. para c.t.p. $(t, x) \in \mathcal{K}$.

(g₃) $z \mapsto g(t, x, z(t, x))$ es monótona para c.t.p. $(t, x) \in \mathcal{K}$.

(g₄) $\exists c_1 \geq 0$ tal que $g(t, x, z) \geq -c_1|z|^p - k_1(t, x)$, $k_1 \in L^1(\mathcal{K})$.

Sea $h: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ tal que:

(h₁) h es s.c.i.

(h₂) $\exists c_2 > 0$ tal que $h(\xi) \geq c_2|\xi|^p - k_2$, $k_2 \in \mathbb{R}$.

Sea $f: \mathcal{K} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ tal que:

(f₁) f es $\mathcal{L} \times \mathcal{B}(\mathbb{R})$ -medible.

(f₂) $v \mapsto f(t, x, v)$ es monótona para c.t.p. $(t, x) \in \mathcal{K}$.

(f₃) $v \mapsto f(t, x, v)$ es convexa para c.t.p. $(t, x) \in \mathcal{K}$.

(f₄) $\exists c_3 \geq 0$ tal que $f(v) \geq -c_3|v|^p - k_3$, $k_3 \in \mathbb{R}$.

Además, se impone que:

$$1 - 2^{p-1}|b-a|^p \frac{c_1 T^p + c_3}{c_2} > 0. \quad (5.3)$$

Debemos hacer otra suposición, que es la siguiente: f y g son monótonas en el mismo sentido, esto quiere decir que ambas son no crecientes o ambas son no decrecientes.

Consideremos:

$$\min_{z \in Z} J_1(z) \quad (P_1)$$

donde:

$$\begin{aligned} J_1(z) = & \int \int_{\mathcal{K}} g(t, x, z(t, x)) dt dx + \int \int_{\mathcal{K}} h(z_{tx}(t, x)) dt dx + \\ & + \int \int_{\mathcal{K}} f(t, x, z_t(t, x)) dt dx \end{aligned}$$

el conjunto Z se define como:

$$Z = \left\{ z \in W^{*,p}(\mathcal{K}): z = \varphi, \text{ en } \partial_+ \mathcal{K}, \quad z \leq \psi, \text{ en } \mathcal{K} \right\}$$

donde $\partial_+ \mathcal{K} = \{0\} \times [a, b] \cup [0, T] \times \{a\} \cup \{T\} \times [a, b]$ y, ψ es una función medible; además φ es una función continua sobre $\partial_+ \mathcal{K}$ tal que las restricciones de φ a

cada uno de los tres lados del rectángulo \mathcal{R} es absolutamente continua, denotada por AC, con derivadas en L^p donde $1 < p < +\infty$, es decir $\varphi \in AC(\partial_+ \mathcal{R})$, $\varphi_l, \varphi_r \in L^p(\partial_+ \mathcal{R})$.

Por otra parte, sabemos que $\forall z \in W^{*,p}(\mathcal{R})$ se verifica:

$$z(t, x) + z(0, a) - z(0, x) - z(t, a) = \int_0^t \int_a^x z_{rs}(r, s) dr ds.$$

En particular, si $z \in \mathcal{Z}$ tenemos:

$$z(t, x) + \varphi(0, a) - \varphi(0, x) - \varphi(t, a) = \int_0^t \int_a^x z_{rs}(r, s) dr ds.$$

Teorema 5.8. *Sean f, g y h que satisfacen las hipótesis (H1). Si $J_1(z)$ toma un valor finito para algún $z \in \mathcal{Z}$, entonces (P_1) admite al menos una solución.*

Demostración:

Se divide en tres partes:

A. Probar que el problema convexificado (P_1^{**}) tiene solución usando (5.3), y siguiendo el razonamiento del Método Directo, descrito en la Sección 3.

B. Sea \tilde{z} una solución del problema convexificado y supongamos que $f(t, x, \cdot)$ y $g(t, x, \cdot)$ son no decrecientes para c.t.p. $(t, x) \in \mathcal{R}$. En virtud de la Proposición 5.7, podemos utilizar el Lema 5.5 para $v = \tilde{z}_n \in L^p(\mathcal{R})$, y así obtenemos que $\exists w \in L^p(\mathcal{R})$ que verifica:

$$\int_a^b w(t, x) dx = \int_a^b \tilde{z}_n(t, x) dx \quad (5.4)$$

$$\int_a^b h(w(t, x)) dx = \int_a^b h^{**}(\tilde{z}_n(t, x)) dx \quad (5.5)$$

$$\int_a^x w(t, s) ds \leq \int_a^x \tilde{z}_n(t, s) ds, \quad \forall (t, x) \in (\mathcal{R}). \quad (5.6)$$

C. Consideramos:

$$\begin{aligned} z_n(t, x) &= w(t, x) \\ z(0, x) &= \varphi(0, x) \\ z(t, a) &= \varphi(t, a) \end{aligned} \quad (5.7)$$

Demostraremos que z , solución de este problema, es solución de (P_1) . Es fácil ver que $z(T, x) = \varphi(T, x)$. De (5.7) y (5.6), tenemos:

$$z(t, x) \leq \tilde{z}(t, x), \quad \text{para c.t.p. } (t, x) \in \mathcal{K}. \quad (5.8)$$

$$z_t(t, x) \leq \tilde{z}_t(t, x), \quad \text{para c.t.p. } (t, x) \in \mathcal{K}. \quad (5.9)$$

Así, $z \in \mathcal{Z}$.

Veamos que z es mínimo de (P_1) como $f(t, x, \cdot)$ y $g(t, x, \cdot)$ son no decrecientes para c.t.p. $(t, x) \in \mathcal{K}$, entonces (5.8) y (5.9), implican que:

$$g(t, x, z(t, x)) \leq g(t, x, \tilde{z}(t, x)), \quad (t, x) \in \mathcal{K}. \quad (5.10)$$

$$f(t, x, z_t(t, x)) \leq f(t, x, \tilde{z}_t(t, x)), \quad (t, x) \in \mathcal{K}. \quad (5.11)$$

Por tanto;

$$\int \int_{\mathcal{K}} g(t, x, z(t, x)) dt dx \leq \int \int_{\mathcal{K}} g(t, x, \tilde{z}(t, x)) dt dx \quad (5.12)$$

$$\int \int_{\mathcal{K}} f(t, x, z_t(t, x)) dt dx \leq \int \int_{\mathcal{K}} f(t, x, \tilde{z}_t(t, x)) dt dx \quad (5.13)$$

Por otra parte, de (5.7) en (5.5), obtenemos

$$\int \int_{\mathcal{K}} h(z_{\text{tr}}(t, x)) dt dx = \int \int_{\mathcal{K}} h^{**}(\tilde{z}_{\text{tr}}(t, x)) dt dx. \quad (5.14)$$

Como \tilde{z} es solución de (P_1^{**}) , (5.14) implica que

$$\begin{aligned} \int \int_{\mathcal{K}} g(t, x, z(t, x)) dt dx + \int \int_{\mathcal{K}} f(t, x, z_t(t, x)) dt dx &\geq \\ &\geq \int \int_{\mathcal{K}} g(t, x, \tilde{z}(t, x)) dt dx + \int \int_{\mathcal{K}} f(t, x, \tilde{z}_t(t, x)) dt dx. \end{aligned}$$

Esto, junto con (5.12) y (5.13) prueban que:

$$\begin{aligned} \int \int_{\mathcal{K}} g(t, x, z(t, x)) dt dx + \int \int_{\mathcal{K}} f(t, x, z_t(t, x)) dt dx &= \\ &= \int \int_{\mathcal{K}} g(t, x, \tilde{z}(t, x)) dt dx + \int \int_{\mathcal{K}} f(t, x, \tilde{z}_t(t, x)) dt dx. \end{aligned}$$

Así

$$\begin{aligned} J_1(z) = J_1^{**}(\tilde{z}) &= \int \int_{\mathcal{K}} g(t, x, \tilde{z}(t, x)) dt dx + \int \int_{\mathcal{K}} h^{**}(\tilde{z}_{\text{tr}}(t, x)) dt dx + \\ &+ \int \int_{\mathcal{K}} f(t, x, \tilde{z}_t(t, x)) dt dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \leq \iint_{\mathcal{K}} g(t, x, \bar{z}(t, x)) dt dx + \iint_{\mathcal{K}} h^{**}(\bar{z}_n(t, x)) dt dx + \\
 & \quad + \iint_{\mathcal{K}} f(t, x, \bar{z}_n(t, x)) dt dx, \quad \forall \bar{z} \in \mathcal{Z} \\
 & \leq \iint_{\mathcal{K}} g(t, x, \bar{z}(t, x)) dt dx + \iint_{\mathcal{K}} h(\bar{z}_n(t, x)) dt dx + \\
 & \quad + \iint_{\mathcal{K}} f(t, x, \bar{z}_n(t, x)) dt dx, \quad \forall \bar{z} \in \mathcal{Z}.
 \end{aligned}$$

Lo que prueba que z es solución de (P_1) .

Si $f(t, x, \cdot)$ y $g(t, x, \cdot)$ son no crecientes para c.t.p. (t, x) en \mathcal{K} , la observación 5.2, implica que:

$$z(t, x) \geq \tilde{z}(t, x), \quad (t, x) \in \mathcal{K}.$$

Entonces se verifican (5.10) y (5.11). Repitiendo el mismo argumento anterior se llega a la misma conclusión (5.12) y (5.13). Esto nos hace completar la demostración del teorema.

Observación 5.9. La hipótesis de monotonía, en general, no puede ser eliminada. Para ver esto basta estudiar la siguiente funcional integral:

$$\int_0^1 \int_0^1 |z(t, x)|^2 dt dx + \int_0^1 \int_0^1 \left| 1 - (z_n(t, x))^2 \right| dt dx.$$

Definiendo la sucesión z_k para $i = 1, \dots, 2^{k-1}$ dada por:

$$z_k(t, x) = \begin{cases} \left(t - \frac{2i-2}{2^k} \right) x, & \text{si } \frac{2i-2}{2^k} \leq t \leq \frac{2i-1}{2^k} \\ \frac{1}{2^{k-1}} - \left(t - \frac{2i-2}{2^k} \right) x, & \text{si } \frac{2i-1}{2^k} \leq t \leq \frac{2i}{2^k} \end{cases}$$

El gráfico para $k = 1, 2, 3$, se presenta a continuación.

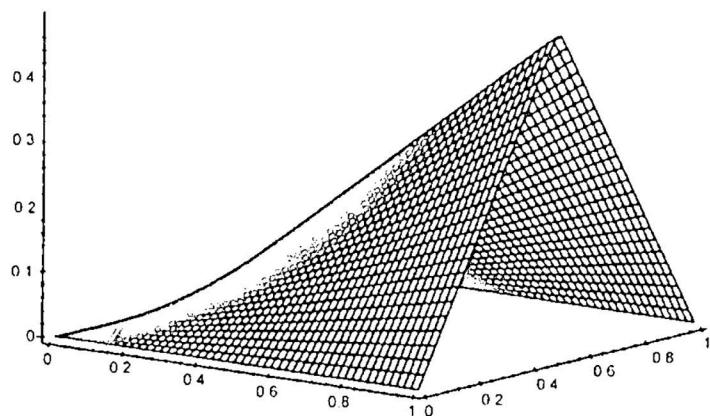


Figura 1. $k = 1; i = 1.$

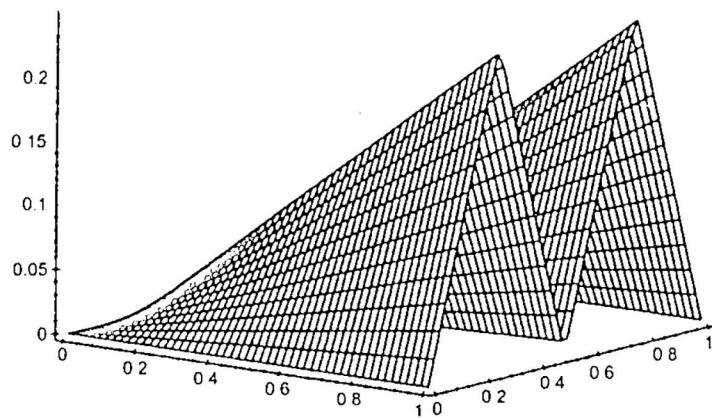


Figura 2. $k = 2; i = 1, 2.$

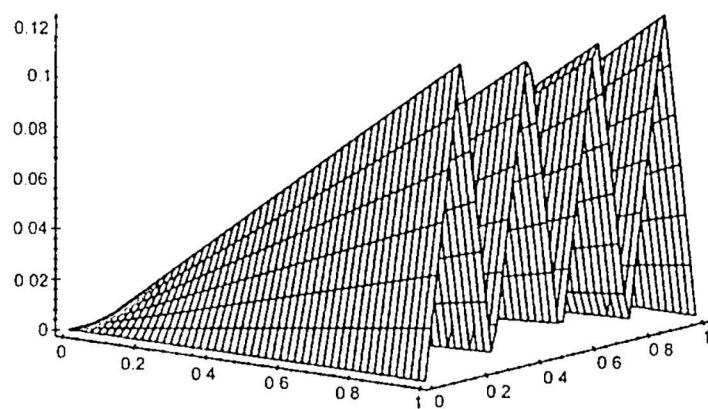


Figura 3. $k = 3; i = 1, 2, 3, 4.$

Motivados por el deseo de obtener un resultado de existencia en un caso más general, es que consideramos ahora $z \in \mathbb{R}^n$.

En particular, consideramos la función $h: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, que verifica: $h(\xi) = \sum_{j=1}^n h_j(\xi')$, donde $\xi = (\xi^1, \dots, \xi^n)$.

Nuestro problema será ahora:

$$\min_{z \in Z} J_2(z) \quad (P_2)$$

donde

$$J_2(z) = \int \int_{\mathcal{K}} g(t, x, z(t, x)) dt dx + \int \int_{\mathcal{K}} \sum_{j=1}^n h_j(z'_j(t, x)) dt dx.$$

En este caso debemos observar que si $z, \bar{z} \in \mathbb{R}^n$, se dice que $z \leq \bar{z}$ si $z^j \leq \bar{z}^j$, $\forall j = 1, \dots, n$. Entonces, una función g se dice *no decreciente* (*o no creciente*) si $\forall z, z'$ tal que $z \leq z'$ se tiene que $g(z) \leq g(z')$ ($g(z) \geq g(z')$).

Para p fijo, si $\xi \in \mathbb{R}^n$ entonces $|\xi|_p \doteq \left\{ \sum_{j=1}^n |\xi^j|^p \right\}^{1/p}$.

Si $z \in L^p(\mathcal{K}, \mathbb{R}^n)$, entonces

$$\|z\|_p \doteq \left\{ \sum_{j=1}^n \int \int_{\mathcal{K}} |z^j(t, x)|^p dt dx \right\}^{1/p} = \left\{ \int \int_{\mathcal{K}} \|z(t, x)\|_p^p dt dx \right\}^{1/p}.$$

Consideremos entonces

Hipótesis (H2)

Sea $g: \mathcal{K} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$ tal que:

- (g₁) g es $\mathcal{L} \times \mathcal{B}(\mathbb{R}^n)$ -medible.
- (g₂) $z \mapsto g(t, x, z(t, x))$ es s.c.i. para c.t.p. $(t, x) \in \mathcal{K}$.
- (g₃) $z \mapsto g(t, x, z(t, x))$ es monótona c.t.p. $(t, x) \in \mathcal{K}$.

$$(g_4) \quad \exists c_1 \geq 0 \text{ tal que } g(t, x, z) \geq -c_1|z|_p^p - k_1(t, x), \quad k_1 \in L^1(\mathcal{K})$$

Sea $h_j: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ tal que:

(h₁) h_j es s.c.i. $\forall j = 1, \dots, n$.

(h₂) $\exists c_2 > 0$ tal que $h_j(\xi) \geq c_2 |\xi|^p - k_2$, $k_2 \in \mathbb{R}$.

Además, se asume que:

$$1 - \frac{c_1}{c_2} 2^{p-1} T^p |b-a|^p > 0. \quad (5.15)$$

Teorema 5.10. Sean g y h que satisfacen las hipótesis (H2). Si $J_2(z)$ toma un valor finito para algún $z \in \mathcal{Z}$, entonces (P_2) admite al menos una solución.

Demostración:

El razonamiento es análogo a la demostración anterior, para cada componente $j = 1, \dots, n$. \square

Observación 5.11. Si a la funcional J_2 agregamos un término de la forma $\int \int_K f(t, x, z_t(t, x)) dt dx$, podemos obtener otro resultado de existencia similar al Teorema 5.9, bajo la hipótesis adicional que tanto f como g sean monótonas en el mismo sentido, además se modificar la condición (5.15).

REFERENCIAS

1. [A-M] M. Amar, C. Mariconda, *A nonconvex Variational Problem with Constraints*, *SIAM Journal Control and Optimization*, 33, 299-307 (1995).
2. [Au-C] J. P. Aubin, A. Cellina, "Differential Inclusions set-valued Maps and Viability Theory", Springer-Verlag., 1984.
3. [A-L] V.I. Arkin, V. L. Levin, *Convexity of values of vector integrals, theorems on measurable choice and variational problems*, *Russian Math Surveys*, 27, 21-85 (1972).
4. [Br] A. Bressan, *A Multidimensional Lyapunov Type Theorem*, *Studia Math.*, 106, 121-128 (1993).
5. [Bri] V. Briceño, *Un resultado tipo Lyapunov en Cálculo de Variaciones*, tesis para optar al título de Ingeniero Matemático, Dpto. Ingeniería Matemática, Universidad de Concepción (Abril, 1998).
6. [B-F] A. Bressan, F. Flores-Bazán, *Multivariable Aumann Integrals and Controlled Wave Equations*, *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 189, 315-334 (1995).

7. [C-M] **A. Cellina, M. Mariconda.** *The Existence Question in the Calculus of Variation: a density result*, Proceedings of the American Mathematical Society, 120, 1145-1150 (1994).
8. [Ce] **L. Cesari**, "Optimization-Theory and Applications", Springer-Verlag, 1983.
9. [CI] **F. Clarke**, "Optimization and Nonsmooth Analysis", John Wiley and Sons, 1983.
10. [Fl1] **F. Flores-Bazán**, *On Radial Solutions to non-convex Variational Problem*, Houston Journal of Mathematics, 22, 161-181 (1996).
11. [Fl2] **F. Flores-Bazán**, *Una introducción al Cálculo de variaciones: el método directo y uno indirecto*, Revista de la Facultad de Ciencias U.N.I. 2, 12-30 (1996).
12. [F-P] **F. Flores-Bazán, S. Perrota**, *Non-convex variational problems related to a hyperbolic equation*, Technical Report, 97-19, DIM Universidad de Concepción (1997). Por aparecer en SIAM J. Control and Optimization.
13. [Gi] **M. Gianquinta**, "Multiple Integrals in the Calculus of Variation and Nonlinear Elliptic Systems", Princeton University Press, 1983.
14. [Ly] **A. A. Lyapunov**, *Sur les fonctions-vecteurs complètement additives*, Izv. Akad. Nauk SSSR, Ser. Mat., 8, 465-478 (1940).
15. [Mo] **C. Morrey Jr.**, "Multiple Integrals in the Calculus of Variations", Springer-Verlag, New York Inc. 1966.
16. [Ne] **L. W. Neustadt**, *The Existence of the Optimal Controls in the Absence of Convexity Conditions*, Journal of Mathematical Analysis and Applications, 7, 110-117 (1963).
17. [Ra1] **J. P. Raymond**, *Existence Theorems in Optimal Control Problems without Convexity Assumption*, Journal of Optimization Theory and Applications, 67, 109-132 (1990).
18. [Ra2] **J. P. Raymond**, *Existence and Bang-Bang Theorems for Control Problems Governed by Hyperbolic Equation*, in "Series on Advances in Mathematics for Applied Sciences", World Scientific, Singapore, New York, Tokio, London, 18, 261-277 (1993).
19. [Su1] **M. B. Suryanarayana**, *A Sobolev Space and a Darboux Problem*, Pacific Journal of Mathematics, 69, 535-550 (1977).
20. [Su2] **M. B. Suryanarayana**, *Existence theorems for Optimization Problems Concerning Linear; Hyperbolic Partial Differential Equations without Convexity Condition*, Journal Optimization Theory Applications 19, 47-61 (1976).
21. [To] **L. Tonelli**, *L'estremo assoluto degli integrali doppi*, Ann. Scuola Norm. Sup. Pisa, 2, 89-130 (1933).

Control de estructuras lineales bajo excitaciones sísmicas

*Fidel Jara Huanca**

Descripción

- Edificios altos bajo excitaciones sísmicas son sujetas a deformaciones grandes y aceleraciones de los pisos. Control de mecanismos reducen tales respuestas.
- Algoritmos instantáneos de lazos-cerrados son implementados para la simulación del control activo de modelos matemáticos de amortiguamiento de masa regulada.

Modelamiento

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{x}} + \mathbf{C}\dot{\mathbf{x}} + \mathbf{K}\mathbf{x} = \mathbf{f}(t)$$
$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} m_1 & & \\ & \ddots & \\ & & m_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} c_1 + c_2 & -c_2 & & & \\ -c_2 & c_2 + c_3 & -c_3 & & \\ & & \ddots & & \\ & & & -c_{n-1} + c_n & -c_n \\ & & & -c_n & c_n \end{bmatrix},$$

(*) Universidad Nacional de Ingeniería, Casilla 1301 Lima - Perú - e-mail: fide@fc-uni.edu.pe

$$K = \begin{bmatrix} k_1 + k_2 & -k_2 & & & \\ -k_2 & k_2 + k_3 & -k_3 & & \\ & & \ddots & & \\ & & & -k_{n-1} + k_n & -k_n \\ & & & -k_n & k_n \end{bmatrix}$$

m_j , c_j , k_j masa interna, amortiguamiento y rigidez del j -th piso

$f(t) = u(t) + w(t) = \text{control} + \text{vectores de carga}$

Modelo activo de amortiguamiento de masa regulada (ATMD)

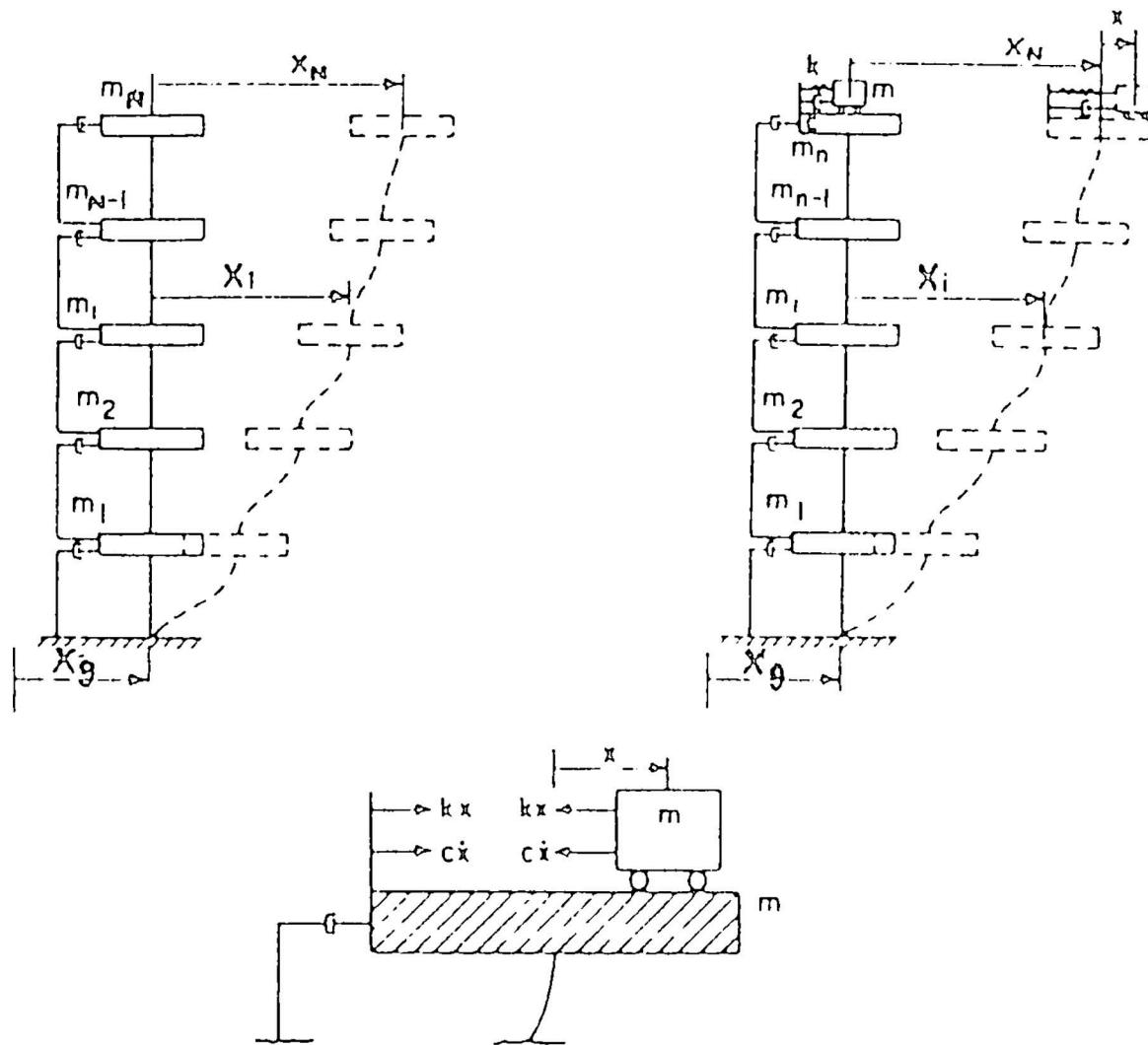


Figura 1: Figura del ATMD.

x = desplazamiento relativo, H = localización de matriz de control $u(t)$,

$$f(t) = Hu(t) - Mv \ddot{X}_g(t) - s \dot{X}_g(t)$$

X_g = aceleración en la base.

$s = \text{col} [\beta_1, \dots, \beta_n]$, β_j = amortiguamiento externo del j -th piso
 $v = \text{col} [1, 1, \dots, 1]$

Modelo activo de tendón

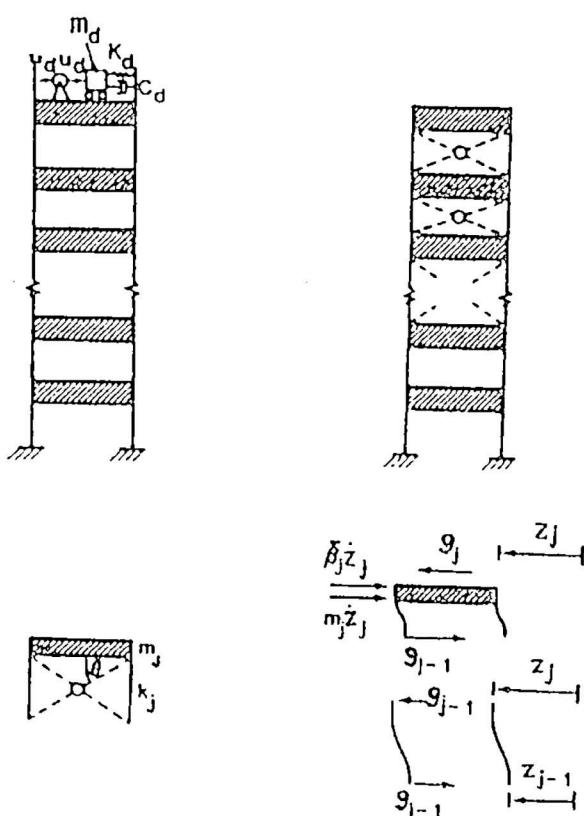


Figura 2: Figura del modelo de Tendón.

$$f(t) = hu_d(t) - Mv \ddot{X}_g(t) - s \dot{X}_g(t)$$

u_d = fuerza activa.

$h = [0, 0, \dots, -1, 1]$ = localización del vector de control u_d

$s = \text{col} [\beta_1, \dots, \beta_n, 0]$

$m_{N+1, N+1} = m_d$ (masa del absorbedor regulado).

Control óptimo

$$J = \int_0^{t_f} [\mathbf{z}^T \mathbf{Q} \mathbf{z} + \mathbf{u}^T \mathbf{R} \mathbf{u}] dt, \text{ función de costo}$$

$$\mathbf{z} = \text{col} [\mathbf{x} \dot{\mathbf{x}}], \mathbf{u}^T = -\mathbf{G}_1 \mathbf{x} - \mathbf{G}_2 \dot{\mathbf{x}}$$

$$\mathbf{Q} = \mathbf{Q}^T \geq 0, \mathbf{R} = \mathbf{R}^T > 0$$

$$\mathbf{u}(t) = -\frac{1}{2} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{B} \lambda(t)$$

$$\mathbf{B} = \text{col} [\mathbf{0} - \mathbf{M}^{-1} \mathbf{H}]$$

$\lambda(t)$ es el multiplicador de Lagrange del Hamiltoniano asociado, dependiendo de \mathbf{M} , \mathbf{C} , \mathbf{Q} , \mathbf{R} y \mathbf{H} , donde λ es asociado con un sistema de control de lazo-cerrado y la excitación es un ruido blanco, puede ser obtenido a través de la ecuación de Riccati, debido a que es proporcional a la variable de estado \mathbf{z} .

Algoritmo de control instantáneo

El intervalo de tiempo de excitación sísmica no se conoce a priori, se sugiere considerar la minimización de la función de costo

$$J(t) = \mathbf{z}^T \mathbf{Q} \mathbf{z} + \mathbf{u}^T \mathbf{R} \mathbf{u}$$

para cada de tiempo del intervalo generado.

Decoplamos la ecuación dinámica para aproximar la respuesta homogénea y libre, luego vamos a las coordenadas originales

$$\mathbf{z}(t) = Td(t - \Delta t) + \frac{\Delta t}{2} [\mathbf{B} \mathbf{u}(t) + \mathbf{w}_1 \ddot{X}_g(t)]$$

donde

$$d(t - \Delta t) = e^{\Lambda \Delta t} \mathbf{T}^{-1} \left[\mathbf{z}(t - \Delta t) + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{B} \mathbf{u}(t - \Delta t) + \mathbf{w}_1 \ddot{X}_g(t) \right]$$

con Λ matriz espectral dada y \mathbf{T} la matriz modal.

La minimización instantánea de la función de costo nos da

$$2\mathbf{Q}\mathbf{z}(t) + \lambda(t) = 0,$$

$$2\mathbf{R}\mathbf{u}(t) - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{B}^T \lambda(t) = \mathbf{0}$$

con \mathbf{z} definido anteriormente. Esto da la siguiente aproximación

$$\mathbf{z}(t) = \left[\mathbf{I} + \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2 \mathbf{B} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{B}^T \mathbf{Q} \right]^{-1} \left[\mathbf{T} d(t - \Delta t) + \left(\frac{\Delta t}{2} \right) \mathbf{w}_1 \ddot{X}_g(t) \right]$$

Simulaciones

La teoría dada en la controlabilidad óptima basada sobre la ecuación de primer-orden, es transferido ahora para la ecuación dinámica original de segundo-orden. Esto es obtenido para modificar:

$$\mathbf{M}_1 \ddot{\mathbf{x}} + \mathbf{C}_1 \dot{\mathbf{x}} + \mathbf{K}_1 \mathbf{x} = \mathbf{f}_1(t)$$

con $\mathbf{K}_1 = \mathbf{K} + \mathbf{H}\mathbf{G}_1$, $\mathbf{C}_1 = \mathbf{C} + \mathbf{H}\mathbf{G}_2$ incluyendo en los casos de masa regulada activa de tendón.

REFERENCIAS

1. [ABD 80] **Abdel-Rohman, & M., Quintana, & V. H., and & Leipholz, H. H.** *Optimal Control of Civil Engineering Structures. Journal of the Engineering Mechanics Division, ASCE, Vol. 106, N° 1, Feb., 1980, pp. 57-73.*
2. [BRO 91] **Brogan, W. L.** *Modern Control Theory. Prentice Hall, Englewood Cliffs, N. J. 1991.*
3. [BRY 75] **Bryson, A. E., R., & Ho, Y. C.** *Applied Optimal Control, Jhon Wiley and Sons, New York, N.Y., 1975.*
4. [CAN 95a] **Canahualpa, G.** *A Solução Dinâmica em Sistemas Mecânicos Amortecidos. Dissertação de Mestrado. UFRGS/CPGMAP, Porto Alegre, 1995.*
5. [CAN 95b] **Canahualpa, G., & Clayssen, J. C. R.** *Numerical Integration of Damper Systems by Using The Dinamical Matrix Solution. ICIAM 95, Hamburgo, Alemanha.*
6. [CLA 90a] **Clayssen, J. C. R.** *On Predicting the Responses of Non Conservative Linear Vibrating Systems by Using Dynamical Matrix Solutions. Journal of Sound And Vibration, 140(1) pp. 73-84, 1990.*
7. [CLA 90b] **Clayssen, J. C. R. & Galichio, E., and Vilhena, M. T.** *Inversión of Higher Matrix Difference and Differential Equations Trought Their Dynamical Solutions. Journal of Mathematical Analysis and Applications, 149(2) pp. 369-376, 1990.*

8. [DIM 76] Dinarogonas, A. D. *Vibration Engineering* West Publishing Co. 1976
9. [GAL 87] Gallicchio, E. *Soluções Dinâmicas. Desacoplamento e Aproximação em Equações Diferenciais Matriciais de Ordem Superior*. Dissertação de Mestrado UFRGS / CPGM, Porto Alegre, 1987.
10. [JUA 80] Juang, J. N., & SAE-UNG, S., & Yang, J. N.. *Active Control of Large Building Structures. Structural Control*, H. H. Leipholz, Ed., North-Holland Publishing Company, Amsterdam, the Netherlands, 1980, pp. 663-676.
11. [LEI 80] Leipholz, H. H., *Structural Control*. North-Holland Publishing Company, Amsterdam, The Netherlands, 1980.
12. [LEI 85] Leipholz, H. H., *Structural Control. Proceedings of 2nd International Symposium on Structural Control*, University of Waterloo, Waterloo, Canada, Jul. 15-17, 1985.
13. [MEI 89] Meirovitch, L. *Dynamics and Control of Structures*. Wiley, New York, 1989.
14. [MEI 70] Meirovitch, L. *Methods of analytical mechanics*. McGraw-Hill, New York, N. Y. 1970.
15. [MIL 88] Miller, R. K., & Marsi, S. F., & Dehghanyar, T. J., & Caughey, T. K.. *Active Vibrational Control of Large Civil Structures*. *Journal of Engineering Mechanics*, ASCE, Vol. 114 Nº 09 Set., 1988, pp. 1.542-1.570.
16. [SAL 61] La Salle, J. L., & Lefschetz, S., *Stability by Lyapunovs direct method whit applications*. Academic Press, Inc., New York, N. Y.
17. [YAN 87] Yang, J., & Akbarpour, A., & Ghaemmaghami, P.. *Instantaneous Optimal Control Algorithms for Structures under Seismic Excitations*. National Center for Earthquake Engineering Research, Technical Report NCEER-87-007, 1987.
18. [YAN 91a] Yan, J. N., & Li, Z. *Instantaneous Optimal Control for Linear, Nonlinear and hysteretic Structures: Stable Controllers*. Tech. Report NCEER-TR-91-0020, National Center for Earthquake Engineering Research, Buffalo, N. Y.
19. [YAN 91b] Yan, J. N., & Li, Z., and Liu, S. C. *Instantaneous Optimal Control with Velocity and Acceleration Feedbacks*. *Probabilistic Engineering Mechanics*, 16(3), part 2, 1991, pp. 204-211.
20. [YAN 91c] Yan, J. N., & LI, Z. *Active and hybrid control of civil engineering structures*. Proc. US-Japan-Korea Trilateral Workshop on Frontier R and D for constructed Facilities. University of Hawaii, Honolulu, Hawaii, 1991, pp. 45-59.
21. [YAN 91d] Yan, J. N., & LI, Z., & Danielians, A., & Liu, S. C. *Optimal hybrid Control of seismic-excited nonlinear and inelastic strustures*. *Intelligent Structures*, Y. K. Yen, ed., Elsevier Applied Science, New York, N. Y., 293-307. 1991.
22. [YAN 91e] Yan, J. N., & Li, Z. *Instantaneous Optimal Control of Linear and Non-Linear Structures-Stable Controller*. Tech. Report NCEER-TR-91-0020, National Center for Earthquake Engineering Research, Buffalo, N. Y.
23. [YAN 92c] Yang, J. N. & LI, Z., & Vongchavalikkul, S.. *A Generalization of Optimal Control Theory: Linear and Nonlinear Structures*. National Center for Earthquaka Engineering Research, Technical Report NCEER-92-0026, 1992
24. [YAO 84] Yao, J. T. P., & SOONG, T. T.. *Importance of Experimental Studies in Structural Control*. Reprint 84-010, ASCE, Atlanta Convention, Atlanta, Ga., May 14-18, 1984

Fabricación y caracterización estructural del SiO_xN_y

A. López y W. Estrada(*)

RESUMEN

El presente trabajo reporta los parámetros de fabricación por rociado pirolítico y la caracterización estructural de los óxidos nitrurados de silicio. Se presentan los resultados del proceso de fabricación en forma de películas delgadas mediante la técnica del rociado pirolítico TRP, en los cuales se ha puesto mucho cuidado en manipular los parámetros más críticos hasta determinar los más óptimos. Acerca de la caracterización se describe los resultados obtenidos mediante las técnicas de: Difracción de rayos X. XRD, Espectroscopía Infrarroja por Transformadas de Fourier FTIR, Microscopía de luz MO, Microscopía Electrónica de Barrido SEM, Microscopía Electrónica de Transmisión TEM, Microscopía Electrónica de Transmisión de Ultra Alta Resolución UHRTEM. Se analiza y se discuten los resultados experimentales detallando el proceso de fabricación óptimo para la preparación de las películas, mediante la determinación de los parámetros de fabricación, y en la parte de la caracterización microestructural y morfológica se aplican las técnicas de caracterización mencionadas resultando que el material es básicamente amorfo y con muy pequeños precipitados cristalinos que ayudó a la caracterización por medio de la difracción electrónica y la UHRTEM.

(*) Facultad de Ciencias Universidad Nacional de Ingeniería. Lima.

Introducción

La literatura científica es abundante en relación a las propiedades ópticas, eléctricas y estructurales del óxido nitrurado de silicio cuyas aplicaciones son cada vez más importantes [1, 2, 3, 4]; sin embargo la fabricación de estos materiales mediante la técnica del rociado pirolítico **TRP** [5,6,7] aún no ha sido ampliamente explorado, motivo por el cual hemos realizado el presente trabajo, considerando la simplicidad y el bajo costo de esta técnica.

La tecnología de películas o recubrimientos delgados tienen una amplia difusión dada las enormes ventajas que poseen los materiales en esta forma, así como sus múltiples aplicaciones; recubrimientos especulares de los resonadores LASER, dispositivos microelectrónicos, conversión fotovoltaica de radiación solar, pasivantes de la corrosión, superconductores de alta temperatura, catalizadores, cerámicos para grandes esfuerzos, dispositivos y materiales biomédicos, superficies selectivas, sensores de gas, electrodos para sistemas foto-electroquímicos, transductores, materiales piezoeléctricos, pantallas fluorescentes de activación electrónica, guías de onda, luminiscencia, etc.

Para la fabricación de las películas delgadas de óxido nitrurado de silicio se usan varias técnicas, como por ejemplo «reactive sputtering» [8], evaporación [9], **rociado pirolítico** [10], etc. Los métodos basados en técnicas de vacío son ampliamente usados para producir películas de buena calidad, pero el rociado pirolítico ha resultado ser una técnica alternativa muy apropiada dada su simplicidad, bajo costo y la posibilidad de fabricar con ella áreas extensas.

En general el proceso de obtención de recubrimientos por **TRP** puede realizarse en forma directa o indirecta, dependiendo de la forma de transportar de las gotas pulverizadas hacia el substrato donde crecerá el material.

En el caso de pulverización directa no hay selección de las gotas de rocío, todos caen al substrato. Las gotas son aceleradas hacia abajo, debido a la presión del gas portador y al efecto de la gravedad.

En el caso de pulverización indirecta se hace una selección de las gotas de rocío, de acuerdo a su velocidad y tamaño; esto es posible hacerlo cuando las gotas ascienden arrastrados por el flujo de gas portador llegando solo las más finas a la superficie del substrato. Las gotas mayores de cierto tamaño crítico vuelven a la solución residual por acción de la gravedad.

El esquema presentado en la fig.1 corresponde al sistema de pulverización indirecta que se empleó para obtener las películas de SiO_xN_y , en este trabajo; los detalles están descritos en las referencias [11, 6].

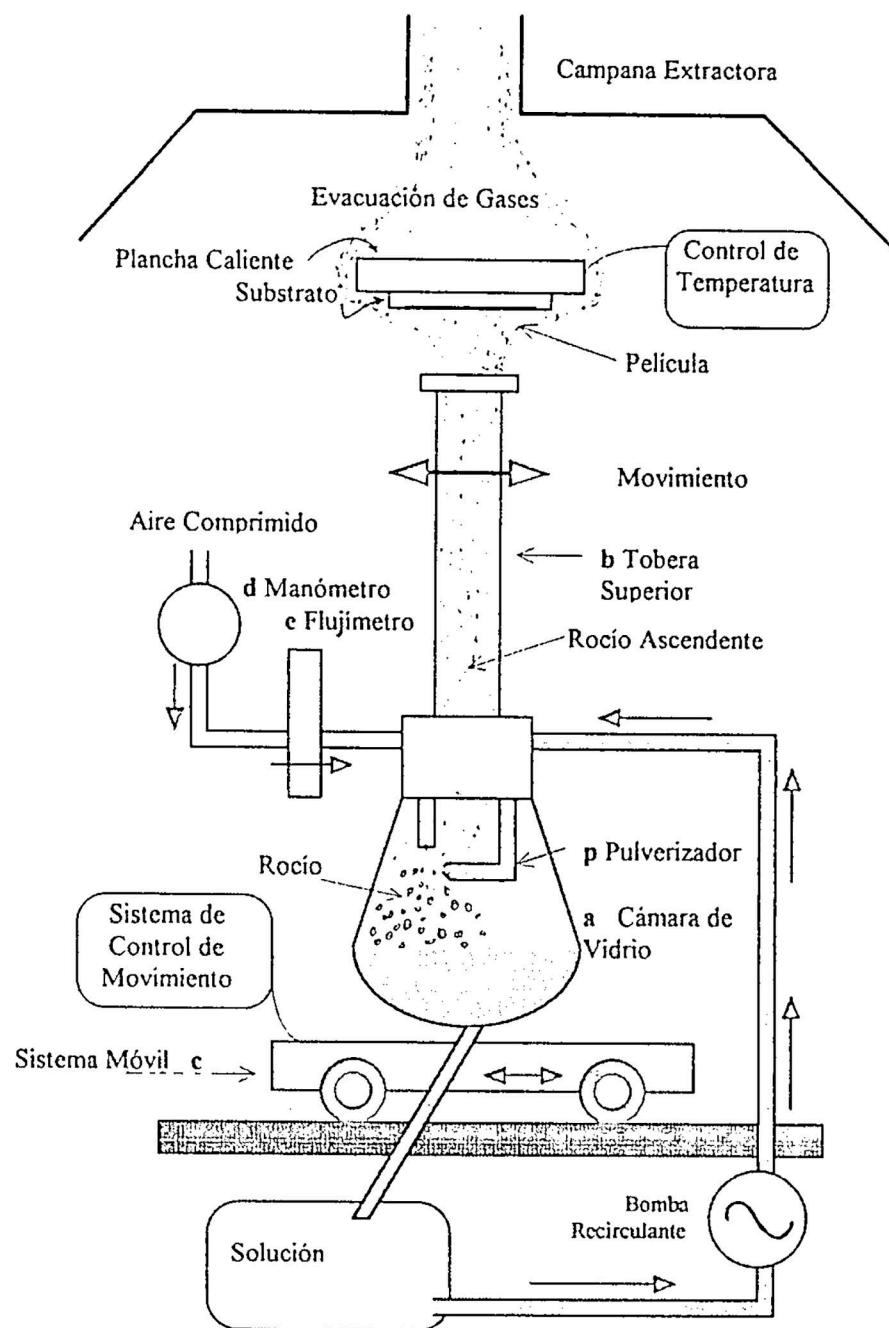


Figura 1. Esquema del sistema de rociado pirolítico indirecto empleado para la fabricación de películas delgadas de SiO_xN_y

Los parámetros importantes a controlar para obtener películas de buena calidad son: Temperatura del substrato (T_s), concentración de la solución (M), acidez de la solución (pH), tipo de solvente utilizado (generalmente agua o alcohol), caudal de la solución (Q_s), presión de aire (P), caudal de aire (Q_a), distancia entre el pulverizador, geometría de la boquilla de la tobera y el substrato, tamaño y uniformidad de las gotas de rocio, el tiempo de rociado y el de tratamiento térmico.

Una de las aplicaciones importantes del SiO_xN_y es la de emisor selectivo en sistemas de enfriamiento pasivo. Para ello un material necesita tener una alta emisividad (teóricamente 100 %) en el rango de la ventana atmosférica (8 - 13 μm) y una alta reflectancia en cualquier otra región. En proporciones adecuadas el SiO_xN_y puede acercarse bastante a este comportamiento.

En los procesos de enfriamiento pasivo por radiación hay que aislar el dispositivo enfriador de los efectos de la convección y la transmisión de calor proveniente del medio ambiente. Esta propiedad enfriadora es posible solo si se dispone de cielo claro, pues este radia a muy bajas temperaturas y el recubrimiento puesto frente a él busca el equilibrio térmico logrando con ello enfriarse en algunos casos hasta 25 °C debajo de la temperatura ambiental nocturna, y 10°C debajo de la temperatura ambiental diurna[13, 1]. Esta propiedad enfriadora del cielo claro es conocido desde hace mucho tiempo, pues en muchos casos es la causante de las frías “heladas” que destruyen los cultivos.

Se ha comprobado que la radiación atmosférica tiene un comportamiento cuyo máximo de emisión coincide con la del cuerpo negro radiando a 50°C; el rango en la cual se encuentra este máximo de radiación es entre 8 y 13 micrones de longitud de onda, al diseñarse los enfriadores radiativos se optimizan centrando el pico de la radiación en este mismo rango

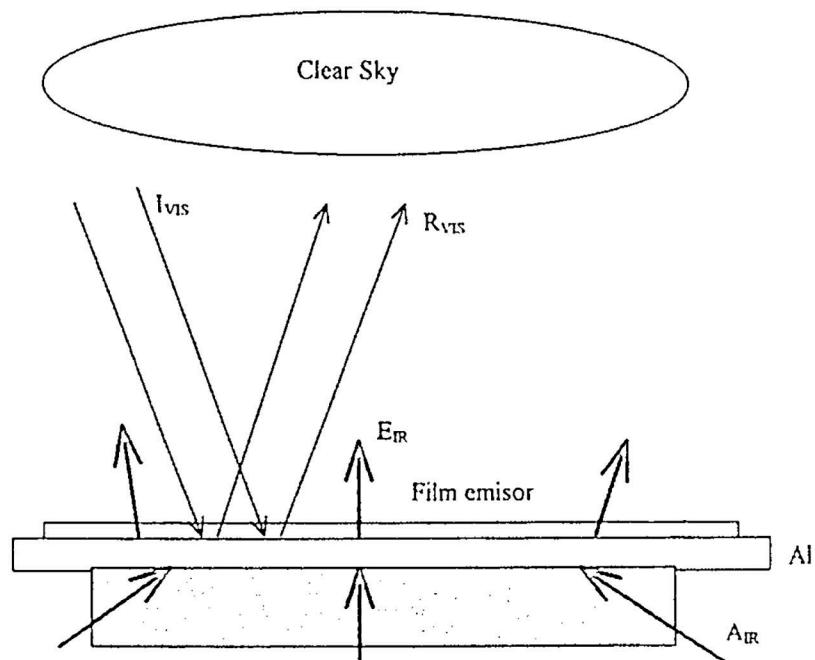


Figura 2. La idea básica para obtener una alta reflectancia es usar una superficie metálica muy pulimentada tal como el aluminio, y cubriendo esta con un emisor selectivo como el SiO_xN_y en el rango entre 8 y 13 mm. Eligiendo un espesor apropiado de la película se puede maximizar la emisión de modo que cubra enteramente el rango de la ventana atmosférica.

Para el mejoramiento del rendimiento como dispositivo emisor en condiciones ambientales se emplea una cubierta de polietileno la cual tiene una gran transparencia en el espectro visible y en la ventana atmosférica, lo cual permite aislar al dispositivo de los efectos de la convección y transmisión del calor ambiental, pero a la vez dejar pasar la radiación IR en el rango de la ventana atmosférica proveniente del substrato.

Fabricación

Los substratos que en el presente trabajo se han utilizado fueron láminas portaobjetos para microscopios de luz; estas se lavaron con agua y detergente y luego se sometió a una fuerte vibración ultrasónica en una cubeta con agua destilada (cubeta ultrasónica Cole Parmer 8850) por 10 minutos, el secado de la misma se efectuó en una estufa. También se utilizaron substratos de aluminio pulido.

Las películas no dopadas fueron obtenidas a partir de soluciones saturadas de ácido silílico en medio amoniácal con tiempos de rociado de 30' seguidos por un tratamiento térmico de 30'. La tabla 1 muestra las condiciones para tres concentraciones diferentes.

Las películas que mostraron mejores adherencias son aquellas obtenidas con una concentración de 0.05 M.

Conc. M. g/mol	Etapas	Tiempo(min)	Temp (°C)
0,025	Spray	30'	130
	T. Térmico	30'	150
0,015	Spray	30'	130
	T. Térmico	30'	50
0,050	Spray	30'	130
	T. Térmico	30'	350

Tabla 1. Variación de los parámetros de concentración y temperatura de tratamiento térmico para obtener una mejor adherencia de la película.

La figura 3 muestra la secuencia empleada en la preparación de la solución amoniácal silícica, para la obtención del SiO_xN_y .

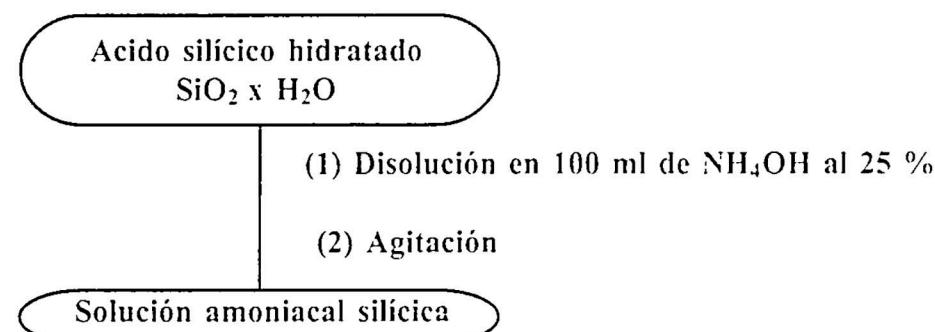


Figura 3. Secuencia de preparación para el rociado pirolítico.

La preparación de soluciones para obtener películas dopadas con nitrógeno, requiere la adición de la sal de nitrato de amonio, como paso adicional correspondiente a la preparación de soluciones de películas de óxido de silicio.

Los resultados de las pruebas experimentales mostraron que las mejores adherencias entre película-substrato se obtuvieron para porcentajes de 2,5% de nitrato de amonio bajo la condición de 0,050 de ácido silícico (ver tabla 1)

La tabla 2 muestra las condiciones para la fabricación de 17 tipos diferentes de muestras.

Nro.	Código	Spray temp (°C)/ tiempo (min)	Descomp. del SiO ₂ xH ₂ O temp(°C)/ tiempo (min)	Tratamiento térmico temp(°C) tiempo(min)	Concent. Normal	Dopante % de NH ₄ NO ₃
01	E2	130 - 18	--	--	0,01	--
02	E3	130 - 30	--	--	0,01	--
03	E4					
04	E7					
05	E8	130 - 40	150 - 30	--	0,025	--
06	E9	130 - 40	150 - 5	--	0,025	--
07	E10	130 - 40	150 - 0	--	0,025	--
08	E14	130 - 20	150 - 5	350 - 40	0,025	--
09	E16	130 - 40	150 - 0	350 - 30	0,015	--
10	E18	130 - 40	150 - 0	350 - 30	0,05	--
11	F9	130 - 9	150 - 0	210 - 60	0,05	2,5
12	F10	130 - 9	150 - 0	200 - 30	0,05	2,5
13	F11	130 - 10	--	170 - 30	0,05	2,5
14	F12	130 - 10	150 - 0	200 - 30		
15	F13	130 - 5	150 - 0	320 - 25	0,01	--
16	F141	130 - 10	150 - 0	350 - 30	0,01	--
17	F14	130 - 5	150 - 0	350 - 30	0,01	--

Tabla 2. Relación de muestras características preparadas con diferentes parametros
(la temperatura de descomposición del reactivo es de 150°C)

Caracterización: Resultados experimentales

Para los análisis por Difracción de Rayos X se ha utilizado un difractómetro **Siemens D-500, Kristalloflex** con fuente de **Cu K α** ($\lambda=1,5406$ Å) con ángulo de rastreo 2θ variable entre 20 y 110°; se usó un patrón de **SiO₂** para la calibración del instrumento de precisión. La reproductibilidad obtenida para 2θ es $+0,0005^\circ$, las distancias interplanares e intensidades son obtenidas usando en programa **DIFFRACT AT** (Siemens). Los resultados de rayos X muestran una estructura amorfa o eventualmente nanoestructurado; no indica picos de difracción.

Los espectros infrarrojos se obtuvieron en un **espectrofotómetro por transformada de Fourier** marca **Nicolet** modelo 550 con accesorio **ATR 59°**. Los espectros de transmisión IR fueron corregidos por software, con el objetivo de referirlos a una línea base y poder eliminar los efectos de interferencias debido al espesor de la película de **SiO_xN_y**.

Alrededor de 2350 cm $^{-1}$ se observa un pico que sistemáticamente se acopla en todos los espectros, tal pico corresponde al **CO₂** atmosférico.

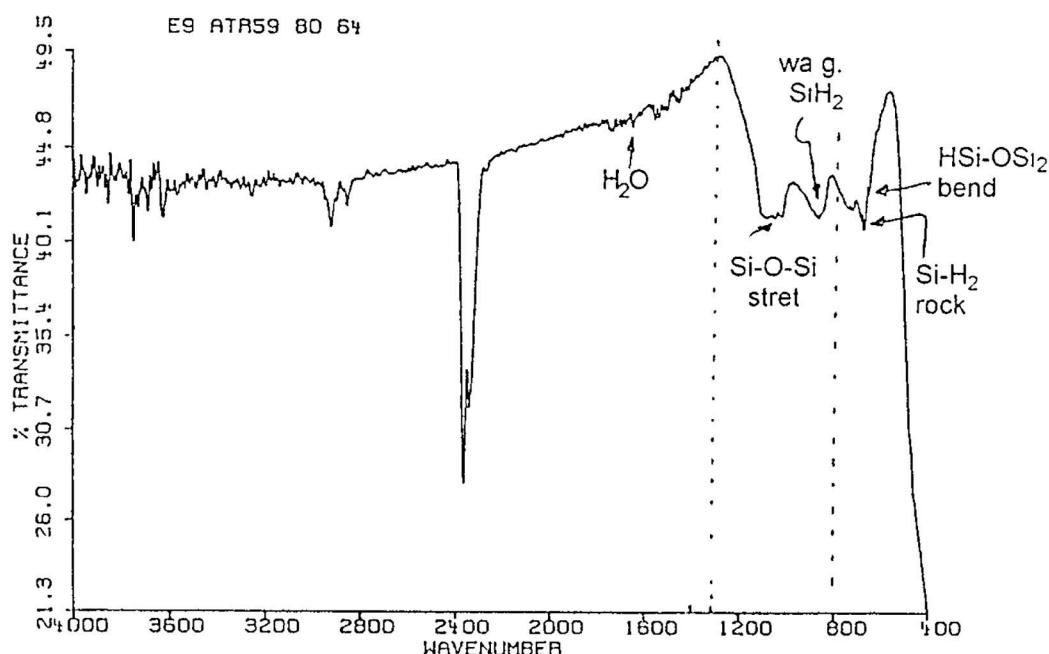


Figura 4. Espectro FTIR de la muestra E9, se aprecia la presencia de los enlaces de: HSi-OSi₂ 640 bending en el plano, Si-H₂ 700 rocking, (SiH₂)_n 845 bending (SiH₂), Si-O-Si 1050, 1080 stretching asimétrico TO, H₂O 1620 deformación.

El microscopio **ORTHOLUX II**.Leitz Wetzlar Germany empleado para este trabajo puede iluminar a las muestras en los modos de transmisión o de reflexión, en los diversos análisis realizados se han empleado las técnicas de Imagen de Transmisión de Campo Claro **BFT**, de Campo Oblicuo **TFT** y de Campo Oscuro **DFT**, así como las imágenes de reflexión de Campo Claro **BFR**.

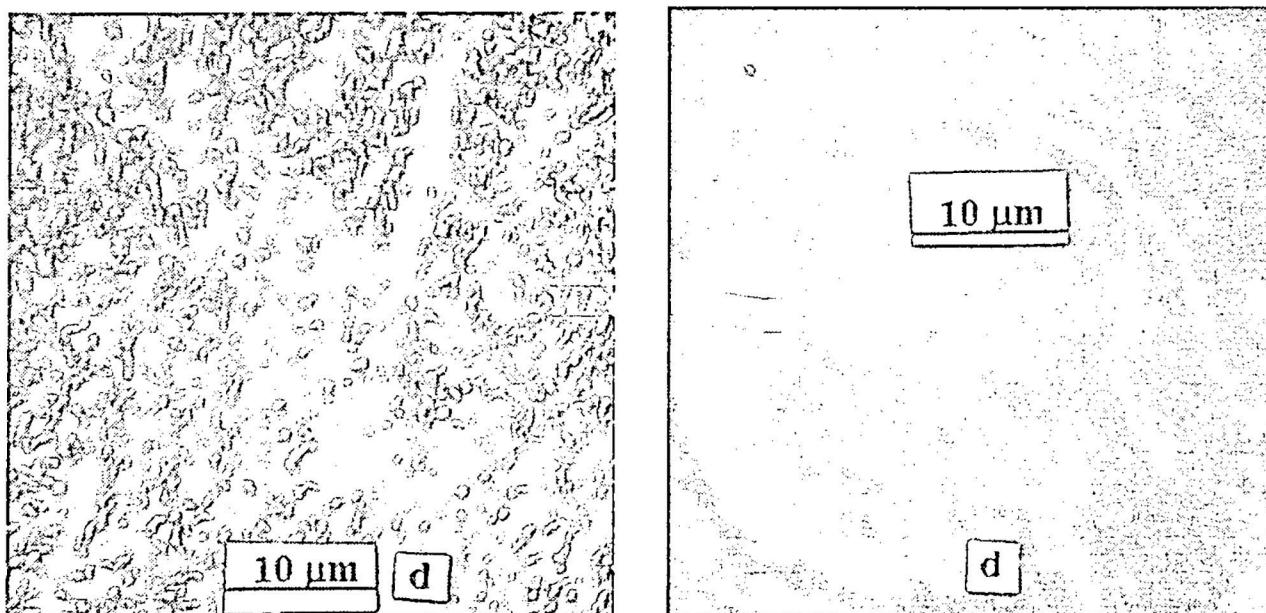


Figura 5. Micrografías de luz A) de la muestra E16. Por medio del campo oscuro observamos una granularidad fina homogénea y rastros superficiales de una intensa deformación plástica. Podemos observar también abundancia de poros muy finos y sin conexión entre ellos, así como esporádicos granos medianos de 2 mm. B) muestra F13 por campo oscuro se observan anillos de bordes muy densos.

Los tamaños de granos observados por el análisis mediante microscopía de luz lo podemos preciar en forma resumida en el cuadro de datos 3.

Muestra	Conglomerado (μm)	Grano fino (nm)	Aspecto
E2	19	1000	
E4	10	1000	
E8		1000	Sup. homogénea
E14	30 y 5		
E16	40 y 20	1000	
E18	50 y 10	2000	
F9	25		
F19	20	1000 y 500	
F113	30		

Tabla 3. Resumen de los datos correspondiente a los tamaños de conglomerados y granos obtenidos por microscopía de luz

Los análisis por SEM de las películas delgadas de SiO_xN_y han sido efectuadas con un SEM Hitachi S-500. Las muestras han sido preparadas mediante una cobertura delgada de oro por medio del dispositivo **cobertor por Sputtering** marca **Electron Microscopy Sciences Mod EM 550** de la Fac. de ciencias de la UNI. Operando a 20 mA, 7×10^{-2} mbar y por espacio de 2 minutos.

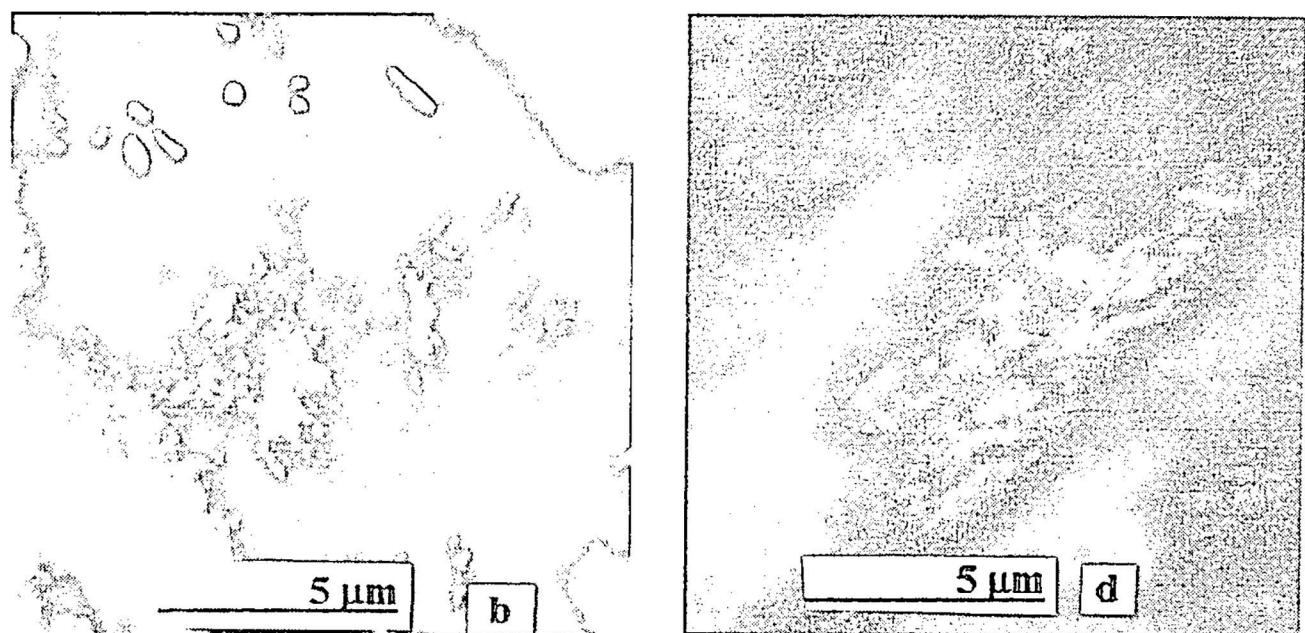


Figura 6. Micrografías SEM A) muestra E2, se observa una superficie irregular compuesta de conglomerados de $4\mu\text{m}$ los mismos que se encuentran tapizados por una granulidad fina. B) muestra E14, se observa una estructura micro dendrítica con intersticios vacíos regularmente dispuestos y ocupando un 40% del volumen total.

Los resultados obtenidos mediante el microscopio electrónico de barrido se han resumido en la tabla 4, en donde incluso podemos apreciar para algunos casos los tamaños de los poros.

Muestra	Conglomerado (μm)	Grano fino (nm)	Diam. De poro (nm)
E2	5	200	100
E4	20	100	
E7	20		1000
E8	3	10	
E14	5	10	
E16		20	
E18		1000	
F9	15 y 3		
F10		50	
F12	12	100	
F13	50	500	
F14		1000	1000

Tabla 4. Resumen de los datos correspondiente a los tamaños de conglomerados y granos finos obtenidos por microscopía electrónica de barrido.

A continuación se presentan los resultados obtenidos con respecto a las características morfológicas granulares y cristalinas de la muestra; este análisis fue efectuado con el MET JEOL 100 CX del Instituto de Física de la UNAM DF

Muestra	Conglomerado (μm)	Grano fino (nm)	Diam. De poro (nm)
E2	100	20, 10, 2, 1	
E3	1000, 100, 50		
E4	50	15	
E7	20	5	
E8			100 15
E9		7	
E10	200		70 10
F9	100	10	
F11	100		
F12	5 a 20 μm		
F13	400		
F14	40	2	

Tabla 5. Resumen de los datos correspondientes a los tamaños de granos finos, y granos ultrafinos obtenidos por microscopía electrónica de transmisión TEM.

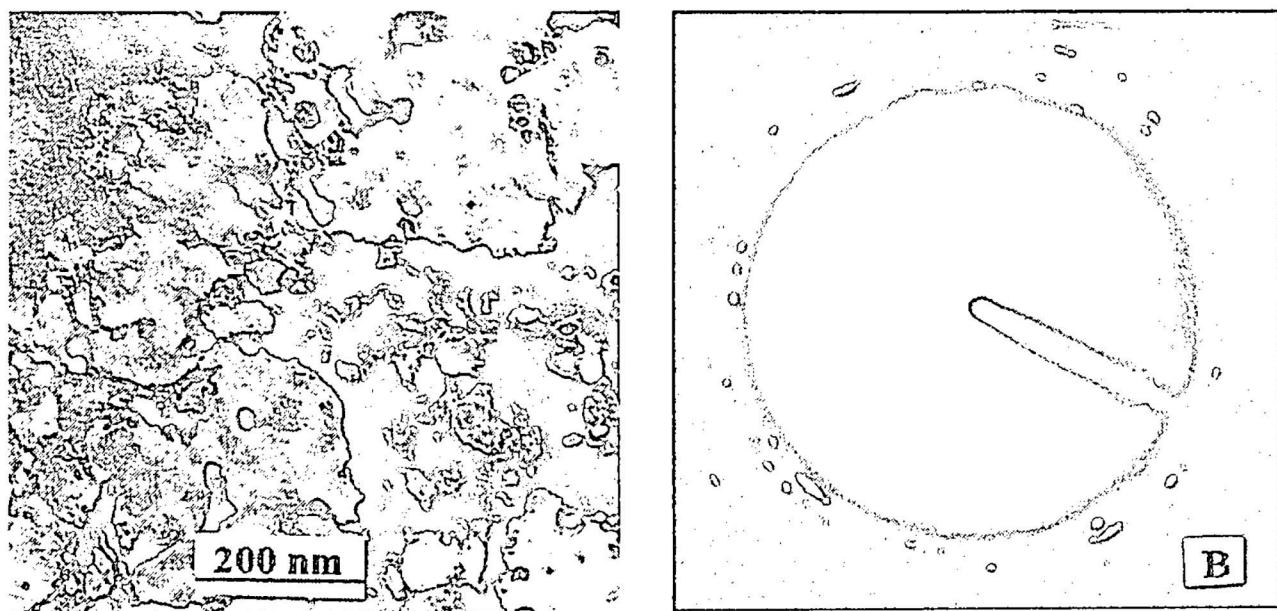


Figura 7. A) muestra E7 se revela la presencia de dos fases, una de granulidad fina de 5 nm con población diferenciada por zona y otra fase de naturaleza granular mas densa y aparentemente producida por proceso de coalescencia. B) difractograma que nos muestra presencia cristalina.

La tabla 6 muestra los datos referentes a los materiales que han sido analizados por difracción electrónica, se debe mencionar que la presencia de estos cristales en forma de precipitados es en muy pequeñas cantidades. Para la calibración de la longitud de cámara se ha usado oro según el procedimiento indicado en la referencia [12].

Si₃N₄

Silicon Nitride

Sys. Tetragonal

$$a_0 = 9,245 \text{ \AA} = b_0$$

$$c_0 = 8,482 \text{ \AA}$$

ficha JCPDS 40 1129

hkl	d _{hkl} Å	d _{hkl}		
		18(3371)	E18(3373)	F141(3354)
200	4,68	-	-	-
002	4,28	-	-	-
102	3,83	3,80	-	-
220	3,32	3,38	-	-
301	2,89	2,89	-	-
20	2,57	-	2,64	-
302	2,51	-	-	2,49
400	2,32	-	-	-
411	2,16	-	-	2,14
420	2,07	1,97	-	-
501	1,80	-	1,86	-
413	1,75	1,73	-	-
530	1,59	-	1,60	-
600	1,54	-	1,52	1,52
424	1,48	-	-	-
216	1,43	1,45	-	-
006	1,41	-	-	-
603	1,35	1,32	1,30	1,31
701	1,187	-	1,18	-
711	1,16	1,17	-	-
721	1,08	1,12	1,07	1,08
614	0,998	-	-	1,00
713	0,97	0,98	-	0,96
800	0,91	0,92	0,92	-
830	0,89	0,89	-	-
118	0,88	0,86	0,88	0,88
841	0,84	-	0,83	0,83
			0,79	0,76

Tabla 6. Cuadro comparativo de las distancias interplanares obtenidos por difracción electrónica de las muestras E18 y F141 con respecto a los datos JCPDS del Si₃N₄

En el presente trabajo tambien se utilizó el Microscopio Electrónico de Ultra Alta Resolución (UHRTEM) JEOL 4000EX de 400 kV del IFUNAM, las nanografías respectivas nos han reportado apreciable información, por ejemplo, se observa que los frentes de crecimiento se ven obstaculizados por la presencia de otros atomos o por las vacancias dando origen a los maclados.

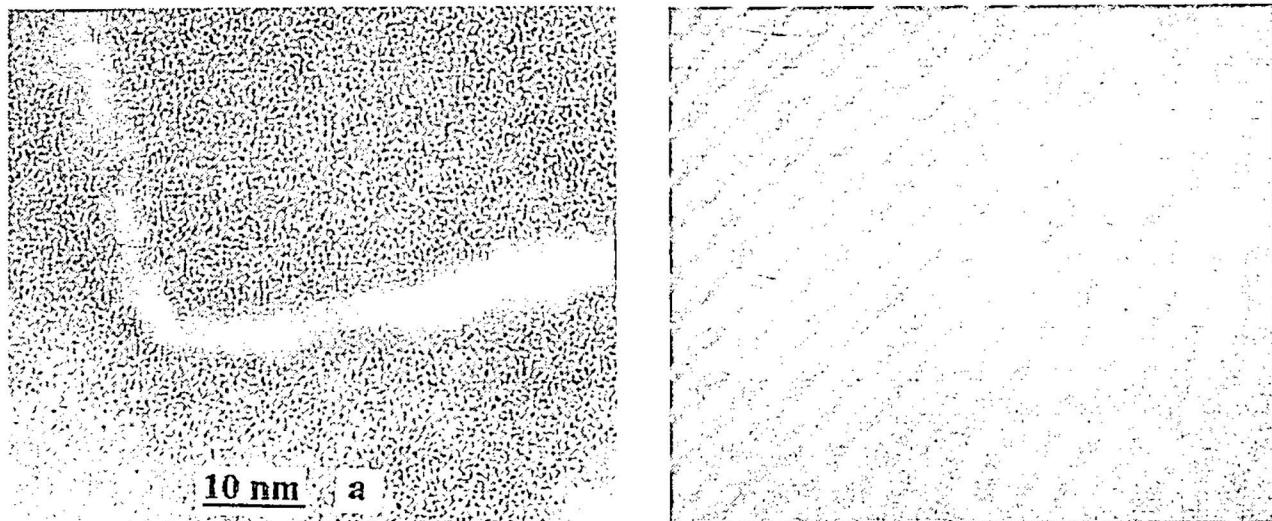


Figura 8. A) muestra F13 se observa que una frontera de grano ha servido como núcleo de cristalización, pueden apreciarse embriones cristalinos en forma de satélites, la esquina granular de 90° sugiere una estructura cúbica. B) se observa un proceso de cambio de dirección en el frente de crecimiento, originado por la presencia de una vacancia.

$d(\text{\AA})$	βSi_3N_4 Hexag.	Si_3N_4 Tetrag.	NH_4NO_3 Orthor.	Si_2ON_2 Orthor.	Si_2N_2O Orthor.
6,94	-	-	-	-	-
2,73	-	-	221	200	020
2,66	101	-	-	-	-
2,595	-	320	-	-	310
2,353	111	400	032	201	021
2,163	201	411	-	112	112
1,73	301	413	332	132	312
$a_0 (\text{\AA})$	7604	9245	7,8984	5,49	8,84
$b_0 (\text{\AA})$	-	-	8,002	8,87	5,47
$c_0 (\text{\AA})$	2,907	8,482	8,002	4,84	4,83
ficha	33-1160	40-1129	43-1431	33-1162	18-1171

Tabla 7. Se muestran los indices de Miller de las distancias interplanares de los materiales indicados y que tienen coincidencia con las distancias experimentales obtenidas de la muestra E3.

Discusión y conclusiones

Las películas de óxido y oxinitruro de silicio fueron obtenidas por la técnica de rociado pirolítico ó pulverización reactiva en fase de vapor. El carácter rugoso de los recubrimientos no permitieron medir el espesor de las películas.

Los mejores resultados se obtuvieron fabricando los recubrimientos en dos etapas: La primera consistía en rociar la solución sobre el substrato a temperaturas entre 130 y 150 °C, y una segunda con un tratamiento térmico que permite la probable sinterización de los granos cristalinos mejorando con ello la adherencia película-substrato.

Una concentración de 0,05 M de $\text{SiO}_2 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ en solución amoniacal, con tiempos de 30 minutos en cada una de las etapas, han dado buenos recubrimientos, concentraciones superiores a 0,1 M no favorecen al proceso de rociado.

La soluciones de ácido silícico en un medio amoniacal son suficientes para obtener películas de oxinitruro de silicio; la adición de nitrato reduce los picos característicos de la absorción en la banda de 13 a 15 micrones, por lo que resultaron inadecuados para usarlos como dopantes.

La adición de un dopante como el nitrato de amonio NH_4NO_3 , proporcionan películas con buena adherencia, pero los excesos de este influyen negativamente en la adherencia de la película.

Por FTIR encontramos la notoria presencia del enlace Si-O-Si 'stretching', entre los 1050 y 1080 cm^{-1} seguido en abundancia del HSi-OSi₂ 'bending' a 640 cm^{-1} y en menor cantidad los enlaces Si-H₂ 'rocking' a 700 cm^{-1} , en todos los casos hay un pico de H₂O a 1620 cm^{-1} , las muestras que tienen menor transmitancia en la ventana atmosférica son el F141, E13, E9 y el E3; no se hace notoria por esta técnica de la presencia del N.

Por Microscopía de Luz se observa que en la mayoría de las muestras hay rastros de una fuerte deformación plástica, las cuales probablemente han sido originadas al frotarlas con papel al hacerles la prueba de adherencia; se observa que el diámetro de los conglomerados varía entre 10 y 50 μm , estos probablemente han sido originados por las gotas del rocio y han solidificado concentrándose en la periferia de la superficie de contacto por posible efectos de la tensión superficial y de la microconvección interna de cada gota. Por la técnica de iluminación por transmisión inclinada (TFT) se observa que el crecimiento laminar es irregular mostrándose zonas a diferentes alturas y de textura superficial suave; los granos pequeños que tapizan la lámina tienen tamaños promedios de 1 μm .

Por **SEM** se observan estructuras con deformación plástica dando un aspecto de rayas finas, tambien podemos apreciar granos medianos cuyos diámetros varían entre 5 y 50 μm , mientras que la granulidad fina tienen tamaños entre 10 y 1000 nm. Algunas muestras tienen una superficie de textura porosa, cuyos diámetros de poros miden entre 100 y 1000 nm

Se pueden observar estadios avanzados de un proceso de sinterización originados por el tratamiento térmico, en algunos casos se ven claramente los cuellos de unión de los granos, mientras que en otros se nota un proceso de fusión bastante avanzado, por lo que llegan a mostrar texturas superficial muy compactas y de muy baja superficie efectiva. En ningun caso se observaron indicios de estructuras cristalinas.

Por **TEM** se observan partículas muy pequeñas que las hemos catalogado como grano fino, estos tienen un tamaño que varía entre 5 y 400 nm, además se nota una textura ultra fina que se resuelven entre 1 y 15 nm; también se observan porosidades cuyos diámetros de poro varían entre 10 y 100 nm; Por la difracción de electrones se nota una abundante fase amorfá y una pobre presencia cristalina. Los patrones de difracción dificilmente logrados para algunas muestras han reportado los siguientes resultados:

Las muestras E18 y F141 han mostrado indicios de la presencia del Nitrato de silicio Si_3N_4 ; las muestras E16, E18 y F11 muestran la presencia de la cristobalita SiO_2 .

Por **UHRTEM** se ha estudiado solamente la muestra E3, por ser ésta la única muestra que ha posibilitado la observación de una fase muy temprana de crecimiento cristalino, la hace en forma de precipitados y se pueden apreciar algunas formas muy tempranas del nucleamiento cristalino al cual hemos llamado embriones cristalinos. Hemos podido tambien apreciar una forma de nacimiento de macka por la interposición de una vacancia delante del frente de crecimiento cristalino. El análisis de las distancias interplanares estimadas de las nanografías respectivas nos ha arrojado un margen de posibilidades bastante amplio. Sin embargo la mayor distancia interplanar medida en la muestra tiene 6,94 \AA que coincide muy ajustadamente con el parámetro $b_0 = 6,9236 \text{\AA}$ del Oxido de Silicio SiO_2 (cristobalita) tal como se puede deducir de la ficha **JCPDS 39-1425**.

En conclusión podemos decir que por medio de las diferentes técnicas de análisis microestructural que se han usado en el presente trabajo, el SiO_xNy pirolítico es un material de muy baja cristalinidad por lo tanto de muy difícil caracterización estructural. Los datos mas importantes se han logrado determinar por **FTIR**, por medio de la cual observamos que la muestra **F141** tiene un comportamiento

interesante y potencialmente útiles para aplicaciones en refrigeración pasiva; por **difracción electrónica**, se han obtenido datos de mediana fiabilidad debido a lo difícil que resultaron registrar los patrones de difracción; por **UHRTEM** se han observado procesos interesantes acerca de la formación cristalina en una fase muy temprana de su desarrollo y han dado motivo de investigaciones de naturaleza cristalográfica. Se ha podido apreciar algunos mecanismos que originan la formación de los cristales, gracias a la escasa o primitiva cristalinidad. Aparentemente la energía de formación cristalina es muy alta de modo que en el proceso de solidificación por saturación de soluciones salinas (sobre saturadas) no alcanzan a organizarse, a esto se suma el efecto de la temperatura, pudiendo haber sido que el tratamiento térmico haya promovido la formación de estos embriones.

Se puede notar la presencia de los átomos precursores del embrión y la aparición de frentes de crecimiento de naturaleza circular, y los átomos extraños que causan los defectos durante el crecimiento. El tipo de crecimiento laminar viene precedido de conformaciones en forma de lenteja o de almohada dependiendo de las estructuras cristalinas.

En resumen diremos que:

Los Oxinitruros de Silicio comprenden un gran variedad de materiales cuyas propiedades varían ampliamente, dependiendo de las condiciones de preparación y de la estequiometría principalmente.

La composición de las películas influyen fuertemente en las propiedades microestructurales y ópticas; se ha observado que la muestra que mejor absorción tiene en la ventana atmosférica corresponde a **F141** cuyos parámetros óptimos son:

Reactivos y concentración M de las soluciones :	$\text{SiO}_2 \times \text{H}_2\text{O}$ 0,05M
Presión P y caudal de aire Qa :	310 kPa , 12 l/min
Caudal de la solución Qs :	0,25 ml/s
Tiempo del rociado piroítico tr :	10 minutos
Temperatura del substrato Ts :	130 °C
Temperatura del tratamiento térmico Tt :	350 °C
Tiempo del tratamiento térmico tt :	30 minutos
Periodo del equipo de rociado P :	2 s
Distancia entre el pulverizador y el substrato D :	10 mm
Dopante :	Ninguno

Microestructura

Cristalinidad:

Muy baja.

Precipitados:

E18 y F141 Nitrato de silicio Si_3N_4
E16, E18 y F11 cristobalita SiO_2
E18 y F12 Nitrato de Amonio NH_4NO_3 (sistema tetragonal),
F12 Nitrato de Amonio NH_4NO_3 (sistema cúbico).

AGRADECIMIENTOS

A Dwight Acosta, Victor Castaño, José Miguel Yacaman, Mario Miky, José Reyes, Adolfo Cordero, Ernesto Andrade, Luis Rendon, José Abasolo y Pedro Mexia del Instituto de Física de la UNAM, por su colaboración en las pruebas experimentales.

A Gary Hodes e Yizhak Mastai del Departament of Materials and Interfaces del Weizmann Institute of Science de Israel, por sus valiosas discusiones durante la estadía de uno de los autores (A. L.).

A la AID y a la Facultad de Ciencias por el apoyo financiero.

REFERENCIAS

- [1] C. G. Granqvist «Materials Science for solar Energy Conversion systems» Ed By C. G. Granqvist, Pergamon Press. G. Britain 1991.
- [2] E. Hartmannsgruber, U. Rossow, A. Hoyer, P. Lange «Structural and optical properties of nitrided silicon oxide layer rapid thermal grow in a pure N_2O ambient». *Journal of Non-Crystalline Solids* 187 (1995) 380-384.
- [3] A. Sassella, P. Lucarno, A. Borghesi, F. Corni, S. Rojas, L. Zanotti. «Silicon oxynitride study by the tetrahedron model and by spectroscopic ellipsometry» *Journal of Non- Crystalline Solids* 187 (1995) 395-402
- [4] R. K. Iler *The Chemistry of Silica Solubility, Polymerization, Colloid and Surface Properties, and Biochemistry*, John Wiley and Sons U.S.A 1979.
- [5] F. Paraguay D. «Obtención de películas delgadas de óxido de zinc y su caracterización óptica, eléctrica y estructural» Tesis de Lic., Fac. Ciencias, UNI, Lima, Perú, 1993.
- [6] A. Gutarra E. «Obtención de películas delgadas de dioxido de estaño y su caracterización óptica, eléctrica y estructural» Tesis de Lic. Fac. Ciencias, UNI, Lima, Perú, 1990.
- [7] M. Miki Y. and E. Andrade «Growth and structure of thin films obtained by an improved spray pyrolysis technique» *Thin solid films*, 224 (1993)

[8] L. Reimer «*Transmission electron microscopy, physics of image formation and microanalysis*» Spring-Verlag Berlin 1984.

[9] H. Cornelius Jr. «*Dana's manual of Mineralogy*» Jhon Wiley and Sons Inc. U.S.A. 1968

[10] T. Gareth and M. Goringe «*Transmission electron microscopy of material*». Ed. Jhon Wiley and Sons. U.S.A. 1979

[11] F. Paraguay. «Fabricación de películas delgadas de ZnO y ZnO:In Caracterización estructural y eléctrica» Tesis de Maestría Fac. Ciencias, UNI, Lima, Perú, 1997.

[12] A. López «*Principios físicos y aplicaciones de la Microscopía Electrónica de Transmisión*» Tesis de Licenciatura, Fac. Ciencias, UNI, Lima, Perú, 1995.

[13] J. Rodriguez R. «*Fabricación y caracterización de películas de SiO_xN_y para aplicaciones de enfriamiento por radiación*». Tesis de Maestría (Física), Fac. Ciencias UNI, Lima, Perú, 1996.

Estabilidad de fluidos en rotación

Armando Bernui y Edgard Vidalon ()*

RESUMEN

Se sabe que las estrellas se forman a partir de las nubes de gas y polvo presentes en las galaxias; por acción de la gravedad esta materia se condensa liberando energía y elevando la temperatura de la nueva estrella hasta que se estabiliza. El objetivo de este trabajo es entender el mecanismo de evolución de dichas nubes que habrían generado estrellas como nuestro sol dando luego origen a sistemas planetarios. Por ello estudiamos aquí el movimiento y la estabilidad de un fluido, de densidad constante y forma elipsoidal, que rota alrededor de su eje de simetría [1 - 3].

Introducción

Para estudiar la estabilidad de un fluido en rotación alrededor de su eje de simetría consideraremos las ecuaciones viriales del sistema. Estas ecuaciones generalizan las ecuaciones de movimiento de un fluido en función de los tensores de inercia, del potencial gravitatorio, de la energía cinética, etc. Aquí analizaremos las condiciones de equilibrio de dicho fluido y las consecuencias obtenidas al perturbarlo.

(*) Facultad de Ciencias Universidad Nacional de Ingeniería, Apartado 31 - 139, Lima 31.

Definición.- Sea un fluido de masa M sometido a sus fuerzas de gravitación y que ocupa un volumen V . En general la densidad ρ y la presión p son funciones de \vec{x} y de t , sin embargo aquí asumiremos

$$\rho = \rho(\vec{x}), \quad (1)$$

$$p = p(\vec{x}). \quad (2)$$

Definimos el momento de distribución de ρ como el tensor de segundo orden

$$I_{ij} \equiv \int_V \rho(\vec{x}) x_i x_j dV, \quad (3)$$

el momento de presión como

$$\Pi \equiv \int_V p(\vec{x}) dV, \quad (4)$$

el potencial gravitatorio como

$$\phi(\vec{x}) \equiv G \int_V \frac{\rho(\vec{x}') dV'}{|\vec{x} - \vec{x}'|}, \quad (5)$$

el tensor de segundo orden del potencial gravitatorio como

$$\Phi_{ij} \equiv G \int_V \frac{\rho(\vec{x}') (x_i - x'_i) (x_j - x'_j)}{|\vec{x} - \vec{x}'|^3} dV', \quad (6)$$

y el tensor de energía cinética como

$$T_{ij} \equiv \frac{1}{2} \int_V \rho u_i u_j dV', \quad (7)$$

donde \vec{u} es la velocidad de un diferencial de fluido localizado en el punto P .

Ecuación virial de 2do. orden

Las ecuaciones viriales de un sistema son ecuaciones de evolución donde los términos son integrales de volumen de las diferentes variables físicas del sistema, y por esto son las ecuaciones apropiadas para el estudio de la dinámica de fluidos [1, 2].

La aplicación de la 2da. ley de Newton a un diferencial de fluido, usando un sistema de referencia inercial es

$$\rho(\vec{x}, t) \frac{d\vec{u}}{dt} = -\nabla p(\vec{x}, t) + \rho(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \Phi. \quad (8)$$

La aplicación del siguiente teorema

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho(\vec{x}) Q(\vec{x}, t) dV \equiv \int_V \rho(\vec{x}) \frac{dQ(\vec{x}, t)}{dt} dV \quad (9)$$

donde $Q(\vec{x}, t)$ es una propiedad cualquiera del fluido (por ejemplo $\rho, p, m u_k$, etc.), nos conduce a la ecuación Virial de 2do. orden [1]

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho u_i x_j dV \equiv 2T_{ij} + \delta_{ij} \prod + \Phi_{ij}, \quad (10)$$

con $i, j = 1, 2, 3$. Sin embargo nos conviene expresar estas ecuaciones referidas a un sistema de referencia no inercial solidario con el fluido y que gire con velocidad angular constante $\vec{\omega}_0$ respecto a un sistema de referencia inercial. Sean $\{X_1, X_2, X_3\}$ los ejes de este sistema, en tal caso sobre cada elemento del fluido tendremos además los términos debido a las aceleraciones centripeta y de Coriolis:

$$-2(\vec{\omega}_0 \times \vec{u}) dm - \vec{\omega}_0 \times (\vec{\omega}_0 \times \vec{x}) dm. \quad (11)$$

Considerando estos términos la ecuación virial de 2do. orden se transforma en

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V \rho u_i x_j dV &\equiv 2T_{ij} + \Phi_{ij} + \omega_0^2 I_{ij} - \sum_{k=1}^3 \omega_i \omega_k I_{kj} + \delta_{ij} \prod \\ &+ 2 \sum_{l,m=1}^3 G_{ilm} \omega_m \int_V \rho u_l x_j dV. \end{aligned} \quad (12)$$

Pequeñas perturbaciones de un fluido en rotación

Analizemos ahora como reacciona nuestro fluido de forma elipsoidal, que gira a una velocidad angular $\vec{\omega}$, a perturbaciones externas que actúen sobre él. Sea $Q_0(\vec{x}, t)$ la función que describe cualquier propiedad del fluido no perturbado, siendo V el volumen ocupado por este; y sea $Q(\vec{x}, t)$ el valor de dicha función cuando el

fluido ya fue perturbado, siendo entonces $V + \nabla V$ el valor del volumen ocupado.

Sea $\vec{\varepsilon}$ el desplazamiento de un diferencial del fluido ubicado inicialmente en el punto $P(X_1, X_2, X_3)$. Se toma este $\vec{\varepsilon}$ como función de \vec{x} y de t , es decir $\vec{\varepsilon}(\vec{x}, t)$. Luego se define la variación de la integral [1] $\int_V Q_0(\vec{x}, t) dV$ por

$$\delta Q \equiv \int_{V+\nabla V} Q(\vec{x}, t) dV - \int_V Q_0(\vec{x}, t) dV. \quad (13)$$

Usando esta definición se calcula la variación de cada término de la ecuación (12).

Los elipsoides de MacLaurin

Veamos el caso particular de un fluido en rotación que forma un elipsoide de revolución con semiejes $a_1 = a_0, a_2 = a_0, a_3 < a_0$ y que gira junto con los nuevos ejes $\{X_1, X_2, X_3\}$. Tanto el eje de simetría del elipsoide como el vector velocidad angular $\vec{\omega}$ coinciden con el eje X_3 . En tal caso $\vec{u} = 0, \omega_1 = \omega_2 = 0, \omega_3 = \omega_0$.

Así, la ecuación (12) se transforma en:

$$\Phi_{yy} + \omega_0^2 (I_{yy} - \delta_{y3} I_{3y}) = -\delta_{yy} \prod, \quad (14)$$

de aquí:

$$\Phi_{yy} + \omega_0^2 I_{yy} = -\Phi_{33}. \quad (15)$$

De la teoría de potencial gravitatorio [1] tenemos:

$$\Phi_{yy} = -2A_t I_{yy} \pi G \rho, \quad (16)$$

donde

$$A_t = a_0^2 a_3 \int_0^\infty \frac{du}{\Delta(a_t^2 + u)}, \quad (17)$$

y

$$I_{yy} = \frac{M a_t^2 \delta_{yy}}{5}$$

$$\Delta = \sqrt{(a_0^2 + u)^2 (a_3^2 + u)}.$$

Reemplazando (15) en (14) tendremos:

$$\omega_0^2 = 2\pi G \rho \left[A_1 - \frac{A_3 a_3^2}{a_0^2} \right].$$

Integrando (17), y usando (16) obtenemos de la última relación

$$\omega_0^2 = 2\pi G \rho \left\{ \frac{(3 - 2e^2)\sqrt{1 - e^2} \arcsin(e)}{e^3} - \frac{3(1 - e^2)}{e^2} \right\}, \quad (18)$$

donde $e \equiv \sqrt{1 - (a_3/a_0)^2}$ es la excentricidad del elipsoide. La ecuación (18) nos da la condición de MacLaurin para el equilibrio hidrostático con densidad constante. Se observa que ω_0 es una función de e .

Ahora consideremos la perturbación del fluido aplicando el operador δ -definido en (13)- a ambos lados de la ecuación (12). Llevando a cabo los cálculos correspondientes encontramos que

$$\frac{d^2 V_{i,j}}{dt^2} = \delta \Phi_{ij} \omega_0^2 (V_{ij} - \delta_{i3} V_{3j}) + \delta_{ij} \delta \prod + 2\omega_0 \sum_{l=1}^3 \epsilon_{il3} \int_V \rho \frac{\partial \epsilon_l}{\partial t} x_j dV, \quad (19)$$

donde

$$V_{i,j} = \int_V \rho \epsilon_i x_j dV, \quad (20)$$

$$V_{ij} = \delta_{ij} I_j. \quad (21)$$

Ahora asumimos que el desplazamiento de cualquier elemento de fluido es la forma

$$\bar{\epsilon}(\bar{x}, t) = e^{\lambda t} \xi(\bar{x}). \quad (22)$$

Luego la ecuación (19) se convierte en

$$\lambda^2 V_{i,j} = \delta \Phi_{ij} \omega_0^2 (V_{ij} - \delta_{i3} V_{3j}) + \delta_{ij} \delta \prod + 2\omega_0 \sum_{l=1}^3 \epsilon_{il3} \int_V \rho \frac{\partial \epsilon_l}{\partial t} x_j dV. \quad (23)$$

Dando valores a i, j encontramos dos grupos de ecuaciones:

$$\lambda^2 V_{3,1} = \delta \Phi_{31}, \quad (24)$$

$$\lambda^2 V_{3,2} = \delta \Phi_{32}, \quad (25)$$

$$\lambda^2 V_{1,3} - 2\lambda\omega_0 V_{2,3} = \delta \Phi_{13} + \omega_0^2 V_{1,3}, \quad (26)$$

$$\lambda^2 V_{2,3} + 2\lambda\omega_0 V_{1,3} = \delta \Phi_{23} + \omega_0^2 V_{2,3}, \quad (27)$$

$$\lambda^2 V_{3,3} = \delta \Phi_{33} + \delta \prod, \quad (28)$$

$$\lambda^2 V_{1,1} - 2\lambda\omega_0 V_{2,1} = \delta \Phi_{11} + \omega_0^2 V_{1,1} + \delta \prod, \quad (29)$$

$$\lambda^2 V_{2,2} + 2\lambda\omega_0 V_{1,2} = \delta \Phi_{22} + \omega_0^2 V_{2,2} + \delta \prod, \quad (30)$$

$$\lambda^2 V_{1,2} - 2\lambda\omega_0 V_{2,2} = \delta \Phi_{12} + \omega_0^2 V_{1,2}, \quad (31)$$

$$\lambda^2 V_{2,1} + 2\lambda\omega_0 V_{1,1} = \delta \Phi_{12} + \omega_0^2 V_{1,2}. \quad (32)$$

Del grupo de ecuaciones (25), (26), (27) y (28) se obtiene una ecuación algebraica de tercer orden para la variable cuyas soluciones son:

$$\sigma = \omega_0 \equiv \sigma_{T1}, \quad (33)$$

$$\sigma = \frac{1}{2} \left[\omega_0 + \sqrt{\omega_0^2 + 16B_{13}\pi G \rho} \right] \equiv \sigma_{T2}, \quad (34)$$

$$\sigma = \frac{1}{2} \left[\omega_0 - \sqrt{\omega_0^2 + 16B_{13}\pi G \rho} \right] \equiv \sigma_{T3}, \quad (35)$$

donde

$$B_{13} = a_0^2 a_3 \int_0^\infty \frac{udu}{\Delta(a_i^2 + u)(a_j^2 + u)}. \quad (36)$$

Las frecuencias $\sigma_{T1}, \sigma_{T2}, \sigma_{T3}$ definen los Modos Transversales; como dichas cantidades son números reales las oscilaciones resultantes son estables a la perturbación (véase la ecuación (22)). De las ecuaciones (29), (30) y (31) se obtiene otra ecuación de segundo orden para σ , que al resolverse nos da

$$\sigma = \sqrt{\frac{4B_{11} + \frac{a_3^2}{a_0^2}(6B_{33} - 4B_{13})}{\frac{1}{2} + \frac{a_3^2}{a_0^2}}} \equiv \sigma_{P1}, \quad (37)$$

$$\sigma = - \sqrt{\frac{4B_{11} + \frac{a_3^2}{a_0^2}(6B_{33} - 4B_{13})}{\frac{1}{2} + \frac{a_3^2}{a_0^2}}} \equiv \sigma_{P2}, \quad (38)$$

los cuales definen los modos pulsantes de vibración. Como estas cantidades son reales (se puede mostrar que $B_{33} > B_{13}$), entonces estos modos producen oscilaciones estables del sistema (i.e. el fluido elipsoidal).

Finalmente de las ecuaciones (30), (31), (32), (33) obtenemos otra ecuación algebraica, esta vez de segundo orden para la variable σ , al resolverla obtenemos

$$\sigma = \omega_0 + \sqrt{4B_{11} \pi G \rho - \omega_0^2} \equiv \sigma_{Tor1}, \quad (39)$$

$$\sigma = \omega_0 - \sqrt{4B_{11} \pi G \rho - \omega_0^2} \equiv \sigma_{Tor2}, \quad (40)$$

que definen los modos toroidales de vibración.

En el cálculo de estos modos fue utilizado el siguiente teorema de la teoría del potencial gravitatorio:

$$\delta\Phi_y = \pi G \rho \left[-2B_y V_y + a_i^2 \delta_{ij} \sum_{i=1}^3 A_{il} V_{li} \right]. \quad (41)$$

El modo toroidal, que es el más interesante, genera tres casos:

Caso $\omega_0^2 < 4\pi G \rho B_{11}$. En tal caso la frecuencia de vibración es un número real y el movimiento subsecuente del sistema es estable.

Caso $\omega_0^2 > 4\pi G \rho B_{11}$. En este caso podemos analizar

$$\sqrt{(-1)(-4\pi G \rho B_{11} + \omega_0^2)} = i \sqrt{\omega_0^2 - 4\pi G \rho B_{11}}, \quad (42)$$

de modo que de la ecuación (40)

$$\sigma_T = \omega_0 - i \sqrt{\omega_0^2 - 4\pi G \rho B_{11}}. \quad (43)$$

Sea $a \equiv \sqrt{\omega_0^2 - 4\pi G \rho B_{11}} > 0$ luego $\sigma_{Tor2} = \omega_0 - i a$ es un número complejo.

Como fue definido de $\lambda = \sigma - i \Rightarrow \lambda = \omega_0 i + a$. Entonces se observa que en este caso (22) se transforma en

$$\bar{\varepsilon}(\vec{x}, t) = e^{i\omega_0 t} e^{at} \bar{\xi}(\vec{x}). \quad (44)$$

Esta ecuación pone de manifiesto que a medida que aumenta el tiempo t el valor de $\bar{\varepsilon}(\vec{x}, t)$ también crece indefinidamente ocasionando que el desplazamiento de un elemento diferencial del fluido se aleje del centro de masa. En otras palabras el elipsoide de fluido pierde materia. Es decir, el sistema es inestable bajo perturbaciones que conduzcan a los modos toroidales de vibración. En un próximo artículo aplicaremos estos resultados al estudio de la formación del sistema solar.

Caso $\omega_0^2 = 4\pi G \rho B_{11}$.- En este caso la frecuencia de vibración σ es un punto de inestabilidad dinámica que corresponde a un valor crítico de la excentricidad inestable.

REFERENCIAS

- [1] Chandrasekhar S., *Ellipsoidal Figures of Equilibrium*, Dover Pub., N.Y., 1969.
- [2] Lamb H., *Hydrodynamics*, Cambridge univ. press, Cambridge, 1945.
- [3] Rosenkild C., *Stability of Axisymmetric Figures of Equilibrium of Rotating Charged Liquid Drop*, *J. Math. Phys.*, vol 8, # 1., Jan. 1967.

Estudios fotoelectroquímicos de recubrimientos delgados de óxido de titanio

Mónica Marcela Gómez León (*)

RESUMEN

El presente trabajo trata sobre la preparación y caracterización de recubrimientos delgados de óxido de titanio para su aplicación en celdas solares sensibilizadas con colorante, por lo cual la caracterización a la que se le dará mas énfasis es la fotorespuesta de las películas o lo que se denominará IPCE (que proviene del nombre en inglés, Incident photon-to-current efficiency) que es un parámetro que mide la eficiencia del sistema para convertir en corriente eléctrica un fotón incidente de una determinada longitud de onda. Las películas fueron obtenidas por la técnica denominada en inglés «sputtering» que consiste en el depósito de materiales a partir de "targets" o blancos que son bombardeados para que el material de estos sea expulsado y posteriormente depositado en los sustratos deseados. En este trabajo se empleó una plancha de vidrio recubierta de óxido de estaño dopado con Flúor, de una resistencia de $8 \Omega/\square$ de apariencia lechosa a la vista. Las películas fueron obtenidas modificando la temperatura del sustrato que originó diferentes fases del óxido de titanio y el tiempo de crecimiento, que generó películas con diferentes espesores.

Las películas presentaron una rugosidad muy grande que posibilitó una gran adherencia del colorante, que a su vez se reflejó en un valor de IPCE de mas del 40% en el rango visible (520 nm). Estos valores obtenidos son promisorios, por lo cual la continuidad del estudio para optimizar este material se presenta como una opción de gran interés científico y tecnológico.

(*) Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Ingeniería, Lima, Casilla postal 31- 139, Lima-Perú.

Introducción

Las celdas solares basadas en procesos fotoelectroquímicos fueron reconocidas como sistemas de energía solar importantes desde 1970 [1] a partir de lo cual se realizaron muchos estudios para entender el mecanismo de funcionamiento de estas celdas [2,3]. Una contribución importante, en ese camino, presenta la posibilidad de «sensibilizar» la película con un compuesto que permita absorber la mayor parte de la radiación solar. Debido a que dicha radiación se encuentra básicamente en el rango visible los compuestos usados para el proceso de sensibilización presentan color, por lo que son denominados «colorantes». Dichos compuestos pueden ser absorbidos en la superficie del semiconductor. Pero se encontró que la eficiencia cuántica de este tipo de electrodos aumenta la absorción solar en sólo 1 a 2% ya que la presencia del colorante sobre la película es de sólo una monocapa en una superficie homogénea.

Matsumura et al. [4] realizan un notable progreso cuando preparan el primer electrodo con una superficie interna muy grande. Esto generó una fuerte corriente de investigación que dio como resultado celdas solares con 10% de eficiencia [5,6], que las hace competitivas con las desarrolladas usando la tecnología de estado sólido. Este tipo de celda solar sensibilizada con colorante esta constituida por partículas pequeñas del orden de nanómetros que conforman una red porosa que asegura el contacto eléctrico entre dichas partículas que se encuentran depositadas formando un recubrimiento poroso sobre un sustrato conductor. Los fundamentos de la estabilidad de este tipo de celda aún no se entienden y actualmente una gran cantidad de trabajos está siendo realizados para conseguir controlar los parámetros que garanticen una alta eficiencia y durabilidad de las celdas solares sensibilizadas [7-11]. La técnica empleada para la preparación de dichos recubrimientos “nanoestructurados” es la denominada sol-gel, pero esta técnica presenta inconvenientes en la reproducibilidad del material y la adherencia de este. Por otro lado la técnica DC “sputtering” con magnetron es de particular importancia porque permite la preparación en gran escala de películas delgadas [12,13], además permite controlar adecuadamente los parámetros de crecimiento de los recubrimientos, lo cual facilita la reproducibilidad del material obtenido. En el presente trabajo se utilizó para la preparación de los recubrimientos de óxido de titanio la técnica de DC “sputtering” reactivo con magnetron.

Celdas solares sensibilizadas con colorante

Una celda solar sensibilizada con colorante esta compuesta de tres componentes básicos: un *material semiconductor nanoestructurado*, el *electrolito*

y el *contra electrodo*. El colorante (generalmente un compuesto de ligantes orgánicos enlazados a un metal de transición) se absorbe sobre toda la superficie activa de la película, y el electrolito penetra a través del sistema nanoestructurado de la película hasta alcanzar el contacto eléctrico posterior.

Cuando el sistema absorbe luz pueden ocurrir dos efectos: (1) los electrones del semiconductor son excitados de la banda de valencia a la banda de conducción, generando pares electrón-hueco y (2) las moléculas del colorante se excitan produciendo la inyección de electrones a la banda de conducción del semiconductor. En el contraelectrodo los electrones son transferidos a las especies redox del electrolito y estas moléculas redox pueden difundirse en el electrolito hasta oxidar las moléculas del colorante y los electrones regresan al semiconductor completándose de esta manera el ciclo que hace de este sistema reversible.

Preparación de las películas

Las películas de óxido de titanio fueron depositadas por un sistema de DC “sputtering” reactivo con magnetron. El equipo usado fue un sistema Balzers UTT 400 [14]. Antes de iniciar el proceso de “sputtering” la cámara se llevó a una presión de $\sim 10^{-7}$ Torr, por medio de bombas turbo moleculares. Luego se introdujo una mezcla de Ar y O₂ en una proporción controlada (Γ) de O₂/Ar hasta una presión total de ~ 12 mTorr. El sistema estaba provisto de 4 posiciones para ubicar los materiales-blancos de geometría circular plana. Los materiales-blancos fueron platos de Ti (99.9%) de 5 cm de diámetro ubicados a 13 cm del sustrato e inclinados 35° con respecto al plano horizontal. Las polaridades de los magnetos fueron N-S-N. La temperatura del sustrato se incrementó por medio de una resistencia y se controló a un valor τ_s . Para conseguir la uniformidad en las películas se rotó el sustrato durante su crecimiento.

Caracterización estructural de las películas

En este trabajo las medidas de rayos X fueron realizadas en un difractómetro Siemens D5000 con un ánodo de Cu, se empleó el montaje de incidencia rasante. Para identificar los picos del óxido de Ti se usaron los valores estándares para el TiO₂ [15] y la ecuación de Scherrer se empleó para determinar el tamaño de grano cristalino.

La figura 1 muestra los difractogramas de rayos X de incidencia rasante para películas de óxido de Ti depositadas por “sputtering” sobre SnO₂:F a diferentes temperaturas (τ_s). El espesor de todas las películas fue de ~ 260 nm.

No se presentan picos de difracción provenientes del óxido de Ti para películas depositadas a temperatura ambiente y 100°C. Sin embargo fijando la temperatura del sustrato a 200°C, la reflexión (101) de la anatasa se hace visible a un valor de $2\theta = 25.3^\circ$. Para un valor de $\tau_s = 250^\circ\text{C}$ se obtiene una clara evidencia de contar con una mezcla de las fases anatasa y rutilo.

Aplicando la ecuación de Scherrer [16] a la reflexión de la anatasa (101) para la película depositada a $\tau_s = 200^\circ\text{C}$ se encontró un tamaño de grano aproximado de ~ 10 nm, mientras que para la película depositada $\tau_s = 250^\circ\text{C}$ el tamaño de grano obtenido de la misma reflexión fue de ~ 30 nm. Los valores obtenidos de las reflexiones (110) y (101) del rutilo dieron ~ 8 nm.

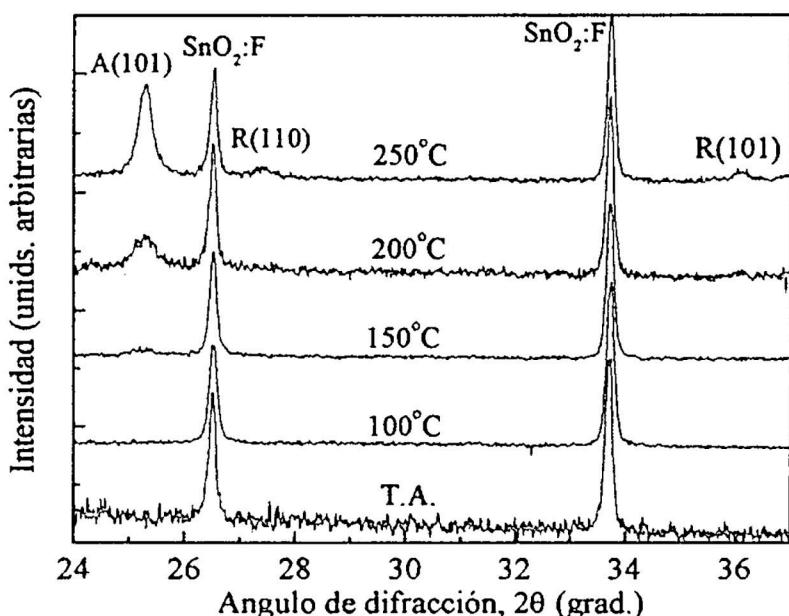


Figura 1. Difractograma de rayos X de películas de óxido de Ti depositadas sobre sustratos de vidrio recubiertos con $\text{SnO}_2:\text{F}$. Durante el depósito de la película el sustrato se mantuvo a temperatura ambiente (T.A.) y a tres temperaturas elevadas que están indicadas en la figura.

Los picos de difracción son asignados a las reflexiones de la anatasa (A) y del rutilo (R).

Eficiencia de la conversión fotón-incidente-corriente

Para medir la fotorespuesta se calculó la “eficiencia en la conversión fotón-incidente-corriente” (el término “IPCE” viene de la expresión inglesa “incident photon-to-current conversion efficiency”) [17]. Esta medida se define como el número de electrones generados en el circuito, por número de fotones (monocromáticos) incidentes en el sistema. Para calcular el IPCE se empleó la expresión 1 que esta normalizada con la carga unitaria e ,

$$\text{IPCE} = \frac{hci_{ph}}{P\lambda} \quad (1)$$

donde h es la constante de Planck, c la velocidad de la luz en el vacío, i_{ph} y P son la photocorriente y la potencia de la radiación incidente por unidad de área respectivamente, y λ es la longitud de onda de la luz incidente. La información correspondiente a los fotones que inciden en el sistema esta dada por los valores de h , c , P y λ . Y la correspondiente información de los electrones que se generan esta dada por el valor i_{ph} . De esta expresión se obtiene un valor igual o menor a la unidad, y que generalmente se expresa en porcentaje.

Al gráfico que presenta el valor del IPCE como una función de la longitud de onda de la luz incidente se le denomina “espectro de acción de la photocorriente”.

Las medidas de IPCE fueron realizadas usando celdas de dos y tres electrodos. Los datos espectrales fueron registrados punto por punto, para longitudes de onda tomadas aleatoriamente para así evitar errores sistemáticos durante la medida.

No se realizaron correcciones por la absorción y reflexión del sustrato. La luz provino de una lámpara de Xe de 450 W de potencia cuyo haz pasó a través de un filtro de agua de 80 mm de longitud, luego por un monocromador (Schoeffel GM 252), después fue focalizado por un sistema de lentes de cuarzo, y finalmente el haz fue dividido en dos: una parte (fracción pequeña) fue direccionada hacia un fotodetector para calibrar la intensidad y la parte restante (fracción mayoritaria) fue dirigida hacia la muestra.

El sistema fue calibrado usando un potenciómetro óptico (Photodyne Modelo 44XL) con un sensor radiométrico constituido por un fotodiodo de silicio (Modelo 400 AS).

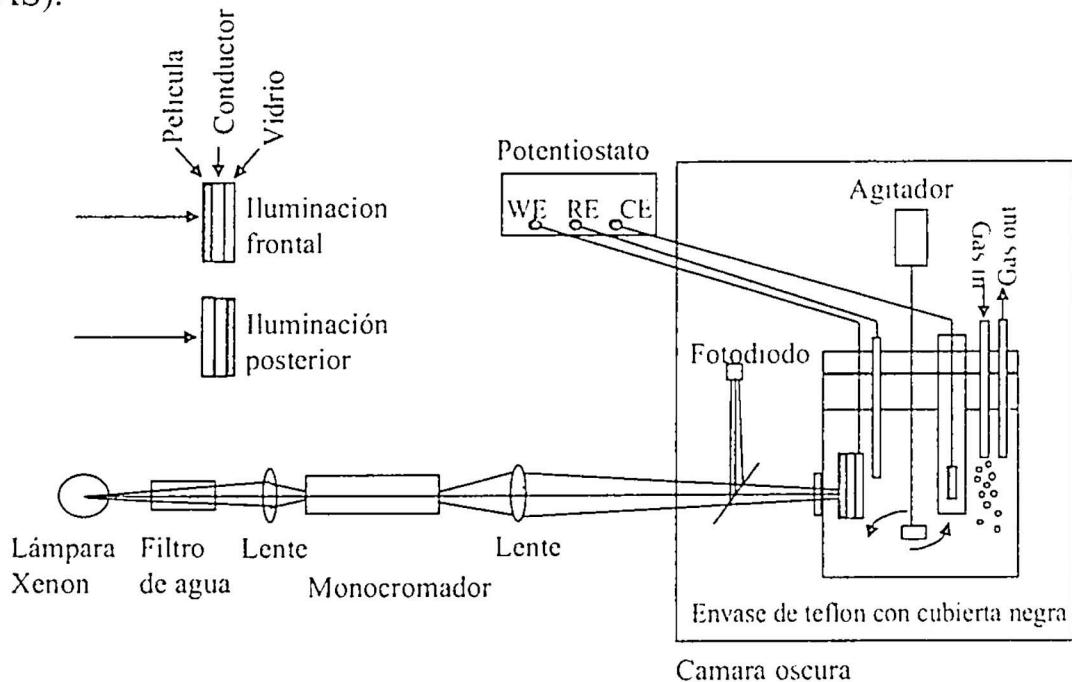


Figura 2. Montaje experimental para las medidas de IPCE en una celda de tres electrodos.

Las medidas de tres electrodos se realizaron sobre muestras *no sensibilizadas* (sin colorante) en un sistema como el mostrado en la Fig. 2 [18]. La película de óxido de Ti fue ubicada como electrodo de trabajo y como contraelectrodo se colocó una red de Pt encapsulado en un tubo de vidrio que tenía en un extremo vidrio fritado; como referencia se usó un electrodo de calomel saturado. Las medidas se realizaron con un potenciómetro Princeton Modelo 173. El electrolito utilizado fue KI 0.1M en agua purgada con nitrógeno. El pH se mantuvo a 6.6 por medio de un buffer de fosfato de potasio 0.02 M. El espectro fue registrado en el rango ultravioleta entre $280 < \lambda < 400$ nm. Al empezar cada medida el electrodo de trabajo fue conectado a 0.3 V y se esperó hasta alcanzar el menor valor de la corriente oscura.

Las medidas de dos electrodos se realizaron en una celda tipo laminar conformada por la película de óxido de Ti sensibilizada (con colorante), una placa de Pt, y entre ellos el electrolito constituido por una solución de 0.5M LiI / 0.05M I₂ en acetonitrilo. La sensibilización de la película se realizó con una solución etanólica de cis-tiocianato-N-bis(2,2'-bipiridil-4,4'-acido dicarboxílico) rutenio II (ver figura 3). La incorporación de este compuesto se consiguió mediante la adsorción del complejo sobre el óxido de Ti. Para conseguir dicha adsorción se introdujo la película en una solución etanólica del colorante a 1×10^{-5} M de concentración. Antes de la sensibilización, la película se calentó hasta 350°C durante 5 minutos, luego se enfrió hasta 80°C, que fue la temperatura a la que se introdujo a la solución para permanecer allí durante un día, el exceso del colorante fue removido con el subsecuente lavado con etanol de la película sensibilizada.

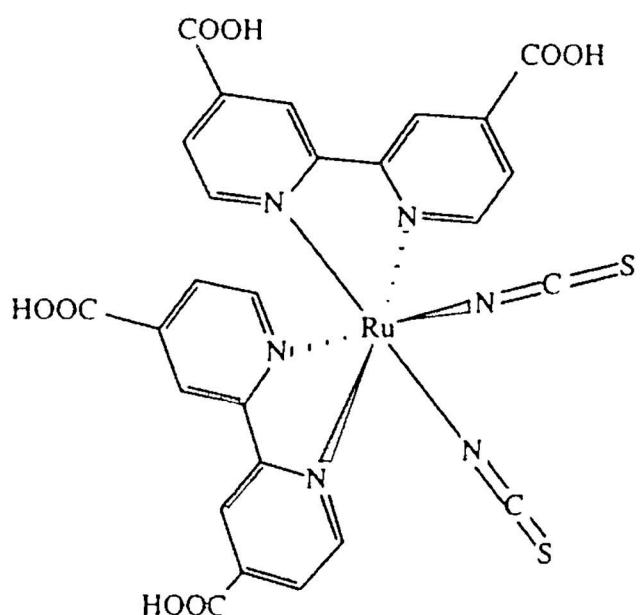


Figura 3. Estructura química del cis-ditiocianato-bis (2,2'-bipiridil 4,4'dicarboxilato) rutenio II, complejo usado como colorante en este trabajo.

La influencia de la temperatura del sustrato se presenta en las figuras 4a y 4b que muestran los valores de IPCE correspondientes a la iluminación frontal y la iluminación posterior medidos en un sistema de tres electrodos, donde las películas no fueron sensibilizadas con colorante. El espesor de todas las películas fue de ~ 260 nm.

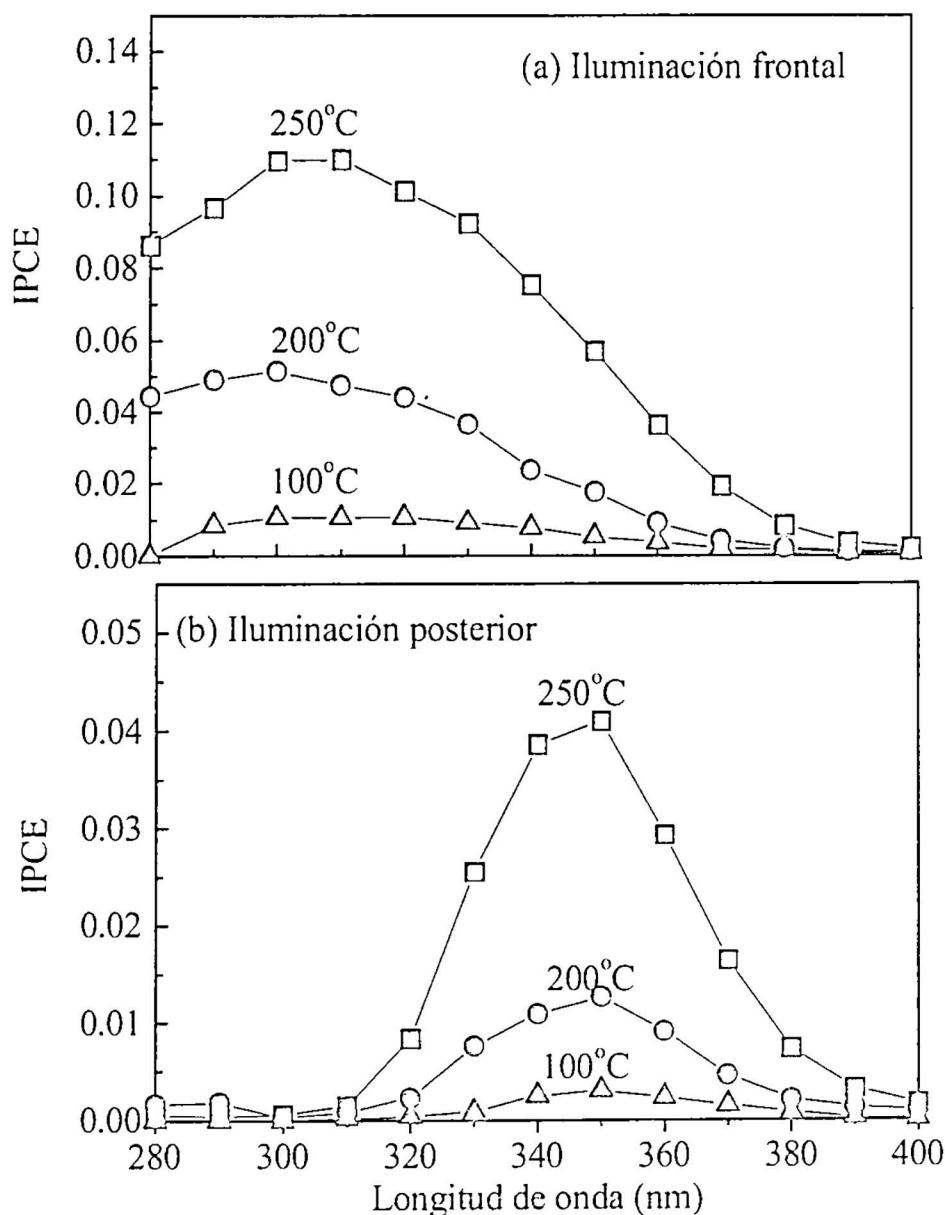


Figura 4. Eficiencia de la conversión fotón-incidente-corriente (IPCE) para (a) la iluminación frontal y (b) iluminación posterior de películas de óxido de Ti depositadas por sputtering sobre láminas de vidrios precubiertas por $\text{SnO}_2:\text{F}$.

Las películas han sido depositadas a las temperaturas que se muestran en la figura. Las medidas se realizaron en un sistema de tres electrodos en un electrolito acuoso con KI al 0.1 M purgado con nitrógeno.

Todos los espectros fueron registrados en el rango ultra violeta entre $280 < \lambda < 400$ nm. Los espectros obtenidos con la iluminación frontal y con iluminación posterior presentan características comunes; así tenemos que la fotorespuesta es mayor a medida que la temperatura del sustrato durante la preparación de la película aumenta. El espectro correspondiente a la película depositada a $\tau_s = 250^\circ\text{C}$ alcanza una fotorespuesta máxima de 11% a $\lambda = 300$ nm, mientras que el valor obtenido para la película depositada a $\tau_s = 100^\circ\text{C}$ alcanza sólo un 1%.

Los espectros correspondientes a la iluminación posterior presentan la absorción característica del sustrato.

La figura 5 presenta la fotorespuesta espectral de una serie de películas con diferentes espesores. Estas medidas se realizaron en un sistema de dos electrodos para el rango visible. Las curvas muestran perfiles similares y la tendencia es que el aumento del valor de IPCE aumenta con el espesor de la película. Los máximos de los valores de la fotorespuesta para todas las películas se encuentran a ~ 530 nm.

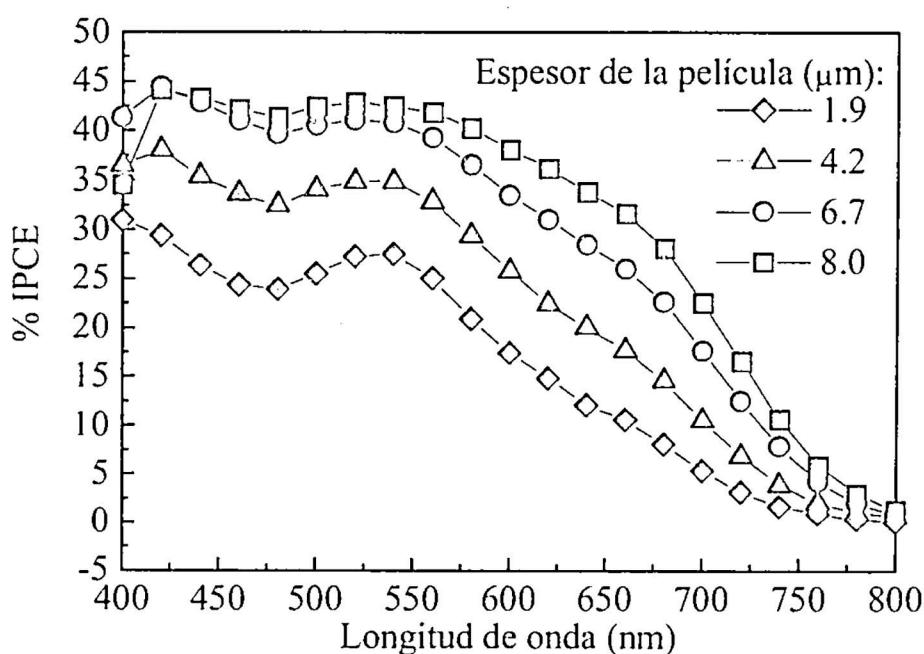


Figura 5. Eficiencia de la conversión fotón-incidente-corriente (IPCE) para películas de óxido de Ti con diferentes espesores. Los puntos representan los datos y las líneas se han trazado como guía visual.

La figura 6 ilustra los valores de IPCE para $\lambda = 530$ nm. La eficiencia aumenta proporcionalmente con el aumento del espesor, a pesar que se presenta una ligera saturación en la película más gruesa.

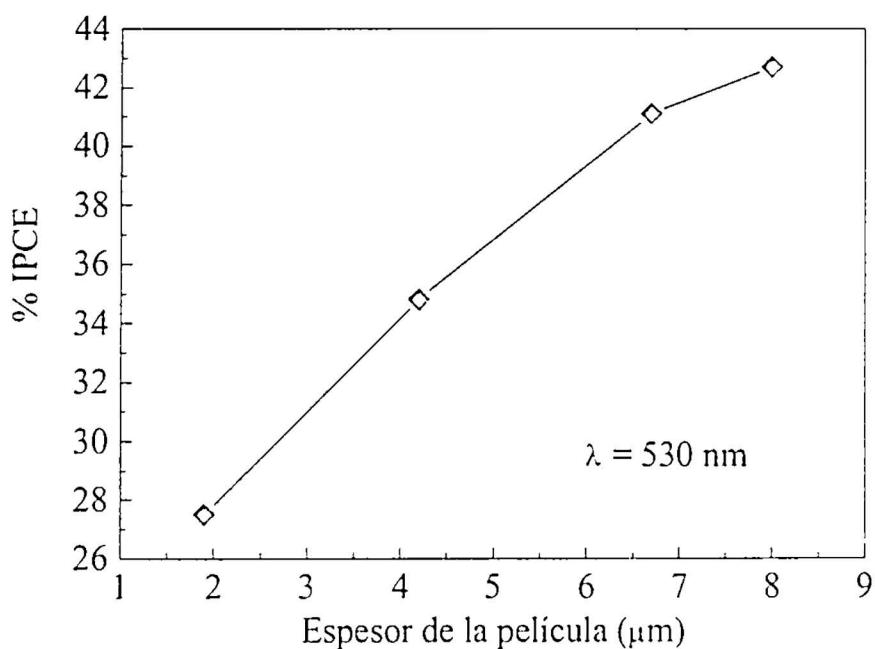


Figura 6. Valores de IPCE para una longitud de onda de 530 nm para películas de óxido de Ti con diferentes espesores. Los puntos representan los datos obtenidos y la línea se ha trazado como guía visual.

Conclusiones

Del comportamiento que presentaron las películas debido a la influencia de la temperatura, se obtuvo el valor de 11% como la máxima fotorespuesta (iluminación frontal) para la película depositada a 250°C para un $\lambda = 300 \text{ nm}$. Para valores menores de temperatura, el valor del IPCE disminuyó sistemáticamente.

Debido a la gran rugosidad superficial de estas películas fue posible sensibilizarlas con el colorante: cis-tiocinato-N-bis(2,2'-bipiridil-4,4'-acido dicarboxílico) rutenio II. En estas películas la eficiencia de conversión fotovoltaica presentó una variación monotónica con el espesor (a mayor espesor mayor valor de IPCE), pero alguna saturación se presentó para espesores mayores a 7 μm . La película más gruesa presentó una fotorespuesta mayor al 40% a una longitud de onda $\sim 530 \text{ nm}$.

Las celdas solares preparadas por “sputtering” aún no compiten con la eficiencia que presentan las celdas preparadas basándose en nanopartículas usando los métodos convencionales, pero la facilidad que brinda la técnica de sputtering de controlar la microestructura de los recubrimientos y además su probada viabilidad en la industria, hacen de gran interés esta técnica para su empleo en las celdas solares sensibilizadas con colorante.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido posible por la financiación del International Program for Physics Science de la Universidad de Uppsala, Suecia.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Fujishima A. y Honda K., *Nature*, 1972, 238,37.
- [2] Butler A., *J. Appl. Phys.*, 1977, 48, 1914.
- [3] Gerischer H., *Electroanalytical Chemistry and Interfacial Electrochemistry*, 1975, 58, 263.
- [4] Matsumura M., Matsudaira S., Tsubomura H., Masasuke T. y Yanagida H., *Ind. Eng. Chem. Prod. Res. Dev.*, 1980, 19, 415.
- [5] O'Regan B. y Grätzel M., *Nature*, 1991, 353, 737.
- [6] Hagfeldt A., Didriksson B., Palmqvist T., Lindström H., Södergren S. and Rensmo H. y Lindquist S.-E., *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 1994, 31, 481.
- [7] Barbé C., Arendse F., Comte P., Jirousek M., Lenzmann F., Shklover V. and Grätzel M., *J. Am. Ceram. Soc.*, 1997, 80, 3157.
- [8] Roušar I., Rudolf M., Lukášek P., Kavan L., Papageorgiou N. y Grätzel M., *Solar Energy Mater. Solar Cells* 1996, 43, 249.
- [9] Grünwald R. y Tributsch H., *J. Phys. Chem. B* 1997, 101, 2564.
- [10] Dloczik, L., Illeperuma, O., Lauermann, I., Peter, L. M., Ponomarev, E. A., Redmond, G., Shaw, N. J., and Uhlendorf, I., *J Phys. Chem. B* 1997, 101, 10281.
- [11] Zkeeruddin, S. M., Nazeeruddin, M. K., Pechy, P., Rotzinger, F. P., Humpmphry-Baker, R., Kalyanasundaram, K. y Grätzel, M., *Inorg. Chem.* 1997, 36, 5937.
- [12] Wasa, K. y Hayakawa, S., *Handbook of Sputter Deposition Technology*, Noyes, Park Ridge, 1992.
- [13] Westwood W. D., *Handbook of Thin Film Process Technology*, edited by Glocker D.A. y Shan S.I., IOP Publ. Bristol, 1998.
- [14] LeBellac D., Niklasson G. A. y Graqvist C. G., *J. Appl. Phys.* 1995, 77, 6145.
- [15] Powder Diffraction Files (Int. Center for Diffraction Data); files 21-1272 and 21-1276.
- [16] Cullity B. D., *Elements of X-ray Diffraction*, Addison-Wesley, Reading, 1959.
- [17] Hagfeldt A. y Grätzel M., *Chem. Rev.*, 1995, 95, 49.
- [18] Resmo H., Lindström H., Södergren S., Willstedt A.-K., Solbrand A. Hagfeldt A. y Lindquist S.-E., *J. Electrochem. Soc.*, 1996, 143, 3173.

Enseñanza

De Newton a Schrödinger

H. G. Valqui ()*

RESUMEN

Corrientemente se considera que el teorema de Ehrenfest es la única conexión entre la ecuación de Schrödinger y la Segunda Ley de Newton. En el presente artículo muestro que añadiendo una 'pequeña' (y adecuada) perturbación a la ecuación de la Segunda Ley, ésta se convierte en una ecuación equivalente a la de Schrödinger.
En un próximo artículo se analizarán algunas de las consecuencias de tal perturbación desde el punto de vista newtoniano.

ABSTRACT

Usually one thinks there is no connection between the Second Newton's Law and the Schrödinger equation other than the Ehrenfest's Theorem. In his article it is shown that a 'very little perturbation' of the Second Law opens the way to arrive at the Schrödinger equation.
In a paper to follow some of the consequences of such perturbation will be analysed from the classical point of view.

(*) Facultad de Ciencias Universidad Nacional de Ingeniería, Apartado 31 - 139, Lima 31.

01: En importantes situaciones físicas, las fuerzas que allí existen son derivadas de un campo de potencial, $V(x,t)$. Por una parte, la Segunda Ley de Newton, SLN, permite hallar todas las posibles trayectorias que realizaría el Sistema Físico en cuestión, y todos los valores de las magnitudes físicas características.

Por otra parte, la ecuación de Schrödinger no proporciona trayectorias, pero si los posibles valores de las magnitudes físicas, incluyendo las posiciones.

Lo anterior sugiere convertir la función momentum, $p(t) \equiv mv(t)$, en un cierto campo físico (es decir, en una función dependiente de la posición y del tiempo). Para ello, siguiendo lo usual en la mecánica variacional, supondremos la existencia de un campo físico,

$$\exists S(x,t) \text{ tal que } P(x,t) = \nabla S(x,t) \quad [01]$$

donde, tratándose de trayectorias de partículas o cuerpos, $P = m \cdot dx/dt$, es el momentum clásico.

02. La Segunda Ley de Newton

$$dp/dt = -\nabla V \quad [02]$$

toma en este caso la forma

$$\frac{dx}{dt} \circ \nabla P + \partial P + \nabla V = 0 \quad , \quad \text{donde} \quad \partial \equiv \frac{\partial}{\partial t}$$

o también

$$1/m \cdot P \circ \nabla P + \partial P + \nabla V = 0$$

es decir,

$$(1/2m) \nabla(P)^2 + \partial P + \nabla V = 0 \quad [03]$$

o también,

$$(1/2m) \nabla(\nabla S)^2 + \partial \nabla S + \nabla V = 0$$

es decir,

$$\nabla \left[(1/2m)(\nabla S)^2 + V + \partial S \right] = 0$$

La anterior expresión entre corchetes es independiente de la posición; sólo puede ser una función del tiempo. Haciendo $(1/2m)(\nabla S)^2 + V + \partial S = dg/dt$, y redefiniendo $S(x,t)$ como $S(x, t) + g(t)$, la ecuación anterior adquiere la forma

$$(1/2m)(\nabla S)^2 + V + \partial S = 0 \quad [04]$$

donde reconocemos a la ecuación de Hamilton-Jacobi, la misma que usualmente es obtenida por medio del Cálculo de Variaciones.

03: La ecuación de Schrödinger es una ecuación diferencial lineal; la de Hamilton-Jacobi no lo es; debido al sumando en $(\nabla S)^2$. En un artículo anterior⁽¹⁾ se hizo notar que dicho término cuadrático aparece en la identidad

$$\nabla^2 (e^{\alpha S}) = [\alpha^2 \cdot (\nabla S)^2 + \alpha \nabla^2 S] e^{\alpha S}$$

donde el coeficiente ha sido colocado preventivamente.

Entonces, multiplicando la ecuación de H-J por la función $e^{\alpha S}$, ella se transforma en:

$$1/(2m\alpha^2)(\nabla^2 e^{\alpha S}) + V e^{\alpha S} + (1/\alpha)\partial e^{\alpha S} - 1/(2m\alpha)(\nabla^2 S) e^{\alpha S} = 0 \quad [5]$$

04: Si hacemos $\alpha \equiv i/h$, $\psi(x,t) \equiv e^{\alpha S(x,t)}$, entonces la expresión [05] toma la forma:

$$-(h^2/2m)\nabla^2 \psi + V\psi + (h/i)\partial\psi - h/(2mi)(\nabla^2 S)\psi = 0 \quad [06]$$

donde, en los tres primeros sumando podemos reconocer a los de la ecuación de Schrödinger:

$$-(h^2/2m)\nabla^2 \psi + V\psi + (h/i)\partial\psi = 0 \quad [07]$$

05: Es decir, partiendo de SLN, [02], hemos llegado a la ecuación de Schrödinger modificada por un término adicional.

06: A continuación procederemos en sentido contrario: Partiremos de la ecuación de Schrödinger [07], para obtener la SLN, claro está, una Segunda Ley modificada por algún término adicional.

Reemplazando $\psi(x, t) = e^{h/i S(x, t)}$ en [07], obtenemos

$$-(h^2/2m)[-1/h^2 \cdot (\nabla S)^2 + i/h \cdot \nabla^2 S] e^{i/h \cdot S} + V e^{i/h \cdot S} + (h/i) \partial e^{i/h \cdot S} = 0,$$

es decir,

$$[(1/2m) \cdot (\nabla S)^2 + h/(2mi) \cdot \nabla^2 S] e^{i/h \cdot S} + V e^{i/h \cdot S} + (\partial S) e^{i/h \cdot S} = 0$$

o también

$$[(1/2m) \cdot (\nabla S)^2 + h/(2mi) \cdot \nabla^2 S] + V + \partial S = 0$$

o, finalmente,

$$(1/2m) (\nabla S)^2 + V + \partial S + h/(2mi) (\nabla^2 S) = 0 \quad [08]$$

que es la ecuación de Hamilton-Jacobi Perturbada, HJP.⁽¹⁾

07: La perturbación es causada por el ‘pequeño’ término $h/(2mi) \cdot (\nabla^2 S)$, donde, desde el punto de vista clásico se cumple que $h \approx 0$.

Aquí debemos remarcar que, mientras en la ecuación de H-J el campo $S(x, t)$ podía ser considerado real, esto ya no es posible en la ecuación ‘perturbada’, donde dicho campo resulta necesariamente complejo.

08: Tomando la gradiente de [08] obtenemos

$$(1/m) (\nabla S) \circ \nabla (\nabla S) + \nabla V + \partial \nabla S + \nabla [h/(2mi) (\nabla^2 S)] = 0$$

y, considerando que $\nabla S = P$, de donde $(1/m) \nabla S = P/m = dx/dt$, la ecuación anterior se transforma en

$$dx/dt \circ \nabla (\nabla S) + \partial \nabla S + \nabla V + h/(2mi) \nabla (\nabla^2 S) = 0,$$

es decir,

$$d/dt (\nabla S) + \nabla V + [h/(2mi)] \nabla^2 (\nabla S) = 0,$$

o también

$$dP/dt + h/(2mi) \nabla^2 (P) = -\nabla V \quad [09]$$

que es lo que llamaremos la Segunda Ley de Newton Perturbada.

CONCLUSIÓN

Considerando que la SLN es válida tanto para un campo de potencial $V(x,t)$, como para un campo físico $S(x,t)$ tal que $P \equiv \nabla S$, entonces es posible perturbar aquella ecuación, añadiéndole un ‘pequeño’ sumando, $h/(2mi) \nabla^2(P)$, obteniendo así la ecuación de Newton perturbada [09].

Esta ecuación de Newton perturbada es equivalente a la ecuación de Schrödinger.

Es necesario tener presente que en la SLN el campo $S(x,t)$ debe ser real para que el momentum P resulte real. En la ecuación perturbada [09], ya esto no es posible; en ella tanto S como P son funciones complejas, donde la función de estado $\psi = e^{i/h \cdot S}$ resultante es tal que el operador $h/i\nabla$, tiene justamente como valor propio al momentum; es decir $h/i\nabla\psi = P\psi$.

También debe notarse que la ecuación de Schrödinger, en su forma [08], se transforma en la ecuación de Newton cuando $h = 0$, lo cual justifica el hecho de considerar que el segundo sumando del primer miembro de [08] ó de [09], es una ‘pequeña’ perturbación.

[En un próximo artículo se aplicará la ecuación de Schrödinger, en su forma de la ecuación de Newton perturbada, a algunos casos específicos, con el objeto de apreciar, desde la perspectiva newtoniana, algunos de los efectos de dicha perturbación].

BIBLIOGRAFÍA

[1] H. Valqui, *Linealización de la Ec. de Hamilton-Jacobi y construcción de los operadores cuánticos. Revista Peruana de Física, Vol. I, N° 1, 1981.*

 dición, diagramación e impresión por
Editorial **HOZLO S.R.L.**

Psje Santa Rosa 191-501, Lima - Perú
Telefax 428-4071

Esta edición consta de 0500 ejemplares.

Lima, Octubre de 1999.

Í N D I C E

Presentación

Investigación

■ Caracterización de células fotovoltaicas por medidas de fotocorriente espectral. <i>Carmen Eyzaguirre, Aníbal Valera, Dominik Essing</i>	3
■ Óptica integrada: Elaboración y caracterización de guías de onda planas. <i>Luis Mosquera, Roddy Ramos, Enver Fernández, Jorge León, Hernán Soldevilla, Guido Castillo, Aníbal Valera, Mauro Lomer</i>	11
■ Técnica de control de vibraciones. <i>Jorge Luis Palacios Felix</i>	20
■ Enumeración de ceros de polinomios complejos. <i>William Carlos Echegaray Castillo</i>	28
■ Un resultado tipo Lyapunov en cálculo de variaciones. <i>Verónica Briceño V. y Fabián Flores Bazán</i>	41
■ Control de estructuras lineales bajo excitaciones sísmicas. <i>Fidel Jara Huanca</i>	60
■ Fabricación y caracterización estructural del SiO_xN_y . <i>A. López y W. Estrada</i>	66
■ Estabilidad de fluidos en rotación. <i>Armando Bernui y Edgard Vidalón</i>	83
■ Estudios fotoelectroquímicos de recubrimientos delgados de óxido de titanio. <i>Mónica Marcela Gómez León</i>	92

Enseñanza

■ De Newton a Schrödinger. <i>H. G. Valqui</i>	103
---	-----