

MOMENTO 54
Enero-julio 2017

Resistividad eléctrica y coeficiente Seebeck en compuestos del tipo Ca(La)MnO preparados por el método de reacción de estado sólido
Electrical resistivity and Seebeck coefficient in Ca(La)MnO compounds prepared by solid state reaction method
Jorge I. Villa, Julio E. Rodríguez 1

Preferential solvation of L-arabinose and DL-malic acid in ethanol + water
Solvatación preferencial de L-arabinosa y ácido DL-málico en mezclas etanol + agua
Zaira J. Cárdenas, Daniel M. Jiménez, Fleming Martínez 14

Dynamics and entanglement of a quantum dot-cavity system coupled by a non-linear optical interaction
Dinámica y entrelazamiento de un sistema cavidad-punto cuántico acoplado por medio de una interacción óptica no lineal
Edgar A. Gómez, Santiago E. Arteaga, Herbert Vinck-Posada 29

Análogos cuánticos y electrodinámicos aplicados al sistema óptico dieléctrico-sustrato para cursos de física
Light-electron wave analogy applied to the optical system dielectric-substrate for physics courses
Jhon H. Vargas, Raúl E. Castiblanco, Jhon Morales 40

Bases for quantum algebras and skew Poincaré-Birkhoff-Witt extensions
Bases para álgebras cuánticas y extensiones torcidas de Poincaré-Birkhoff-Witt
Armando Reyes, Héctor Suárez 54

Delinquir o no delinquir. Un modelo de redes delincuenciales y un algoritmo para su análisis
To commit or not to commit a crime. A criminal network model and an algorithm for its analysis
Fredis Agámez, John F. Cantillo, Javier Montoya, John E. Realpe..... 76



Publicación admitida en:
SciELO Colombia
Fuente Académica Premier (EBSCO)
Índice Nacional de Publicaciones Seriadas, Científicas y Tecnológicas de Colciencias PUBLINDEX
Latindex Sistema Regional de Información en línea para revistas Científicas de América Latina, Caribe, España y Portugal.

Enero-julio 2017

MOMENTO - Revista de Física

Número 54

ISSN 0121-4470

MOMENTO

Revista de Física

No. **54**
ENE-JUL
2017

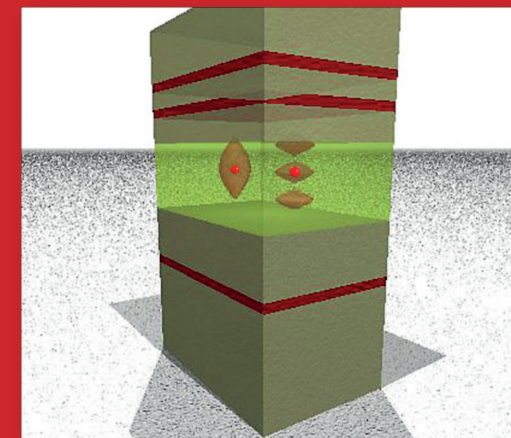


Illustration of two quantum dots (red balls) embedded in a micropillar cavity...

Facultad de Ciencias
Sede Bogotá



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE COLOMBIA

MOMENTO

Revista de Física

Departamento de Física
Universidad Nacional de Colombia
Bogotá, Colombia

La revista MOMENTO publica semestralmente resultados originales inéditos de investigación básica y aplicada en diversas áreas de la física, así como artículos de reflexión, revisión y cortos acerca del estado actual de los problemas más activos de la física, tales como:

- Ciencia e Ingeniería de Materiales.
- Física del Estado Sólido.
- Física de altas energías.
- Óptica.
- Física Médica y Biofísica.
- Geofísica.
- Física Nuclear.
- Fisicoquímica.
- Caos y complejidad.
- Epistemología y Filosofía de la Física.
- Nanociencias y Nanotecnología

MOMENTO se puede recibir:

- A través de canje con publicaciones similares.

Más información en <http://www.revistas.unal.edu.co/index.php/momento>



MOMENTO Revista de Física de la Universidad Nacional de Colombia se distribuye bajo una Licencia Creative Commons Atribución - Sin derivar 4.0 Internacional. Ésta licencia permite la redistribución, comercial o no comercial, siempre y cuando la obra circule íntegra y sin cambios, donde indique su autor y su primera publicación en esta revista..

ISSN 0121-4470

MOMENTO

Revista de Física

No. 54

ENE-JUL
2017

Editor

Alvaro Mariño, Dr. rer. nat. *Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia. Bogotá, Colombia.*

Comité Editorial

Noboru Takeuchi, Ph.D. *Departamento de Nanoestructuras, Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México. Ensenada, México.*

Andrés Rosales, Dr. Sc. *Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia. Manizales, Colombia.*

Eval Baca Miranda, Dr. Sc. *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad del Valle, Colombia.*

Diego Restrepo Quintero, Dr. Sc. *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Antioquia, Colombia.*

Comité Científico

Ángela Camacho, Dr. rer. nat. *Departamento de Física, Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia.*

Hernán Sánchez, Dr. rer. nat. *Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.*

Diógenes Campos, Dr. rer. nat. *Universidad de Bogotá Jorge Tadeo Lozano, Bogotá, Colombia.*

Fernando Cristancho, Dr. rer. nat. *Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia. Bogotá, Colombia.*

Germán Pérez, Dr. Sc. *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad del Valle, Cali, Colombia.*

María Teresa Malachevsky, Dr. Sc. *Centro atómico Bariloche. Instituto Balseiro. CNEA. Argentina.*

Pablo Hernández, Dr. Sc. *Departamento Electricidad y Electrónica, Universidad de Valladolid, España.*

Manuel Vázquez, Dr. Sc. *Departamento de Física da Materia Condensada, Universidade de Santiago de Compostela, España*

Eduardo Padrón, Dr. Sc. *Departamento de Física, Universidad Federal de Pernambuco, Brasil.*

Facultad de Ciencias
Sede Bogotá



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE COLOMBIA

Esta edición contó con el apoyo de:

- o Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá.
- o Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá.

ISSN 0121-4470 (Impreso)

ISSN 2500-8013 (En línea)

doi:10.15446/mo

Edición:

- o Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Colombia.

Cubierta: Imagen seleccionada del artículo "Dynamics and entanglement of a quantum dot-cavity system coupled by a non-linear optical interaction"(pág32).

Diagramación en L^AT_EX:

Mónica B. López Santos

Asistente editorial

© MOMENTO Revista de Física. Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia

Página web: <http://www.revistas.unal.edu.co/index.php/momento>

Correo electrónico: momento_fcbog@unal.edu.co

Dirección Postal: Carrera 30 No 45 03, Edif. 404 (Departamento de Física), Bogotá, Colombia.

Teléfono: (57 1) 3165000 ext.13009

Preprensa y prensa:

Proceditor Ltda.

Calle 1C No.27 A - 01

Teléfonos: 757 92 00 - 313 251 54 98

Bogotá, D.C., Colombia

proceditor@yahoo.es

CONTENIDO

MOMENTO 54 - Enero-Junio, 2017

| | |
|--|----|
| Resistividad eléctrica y coeficiente Seebeck en compuestos del tipo Ca(La)MnO preparados por el método de reacción de estado sólido <i>Electrical resistivity and Seebeck coefficient in Ca(La)MnO compounds prepared by solid state reaction method</i> | |
| Jorge I. Villa, Julio E. Rodríguez..... | 1 |
| Preferential solvation of L-arabinose and DL-malic acid in ethanol + water <i>Solvatación preferencial de L-arabinosa y ácido DL-málico en mezclas etanol + agua</i> | |
| Zaira J. Cárdenas, Daniel M. Jiménez, Fleming Martínez..... | 14 |
| Dynamics and entanglement of a quantum dot-cavity system coupled by a non-linear optical interaction <i>Dinámica y entrelazamiento de un sistema cavidad-punto cuántico acoplado por medio de una interacción óptica no lineal</i> | |
| Edgar A. Gómez, Santiago E. Arteaga, Herbert Vinck-Posada..... | 29 |
| Análogos cuánticos y electrodinámicos aplicados al sistema óptico dieléctrico-sustrato para cursos de física <i>Light-electron wave analogy applied to the optical system dielectric-substrate for physics courses</i> | |
| Jhon H. Vargas, Raúl E. Castiblanco, Jhon Morales..... | 40 |
| Bases for quantum algebras and skew Poincaré-Birkhoff-Witt extensions <i>Bases para álgebras cuánticas y extensiones torcidas de Poincaré-Birkhoff-Witt</i> | |
| Armando Reyes, Héctor Suárez..... | 54 |
| Bases for quantum algebras and skew Poincaré-Birkhoff-Witt extensions <i>Bases para álgebras cuánticas y extensiones torcidas de Poincaré-Birkhoff-Witt</i> | |
| Fredis Agámez, John F. Cantillo, Javier Montoya, John E. Realpe..... | 76 |

**RESISTIVIDAD ELÉCTRICA Y COEFICIENTE
SEEBECK EN COMPUESTOS DEL TIPO $Ca(La)MnO$
PREPARADOS POR EL MÉTODO DE REACCIÓN DE
ESTADO SÓLIDO**

**ELECTRICAL RESISTIVITY AND SEEBECK
COEFFICIENT IN $Ca(La)MnO$ COMPOUNDS
PREPARED BY SOLID STATE REACTION METHOD**

Jorge I. Villa, Julio E. Rodríguez

Grupo de Materiales Termoeléctricos, Departamento de Física, Universidad Nacional de
Colombia, Bogotá, Colombia.

(Recibido: Septiembre/2016. Aceptado: Diciembre/2016)

Resumen

Utilizando el método de reacción de estado sólido se prepararon muestras policristalinas del compuesto $Ca_{1-x}La_x MnO_3$ ($0 \leq x \leq 0.15$). Sus propiedades de transporte se estudiaron en función de la temperatura y el contenido de lantano, a partir de mediciones de resistividad eléctrica $\rho(T)$ y coeficiente Seebeck $S(T)$ en el rango de temperatura entre 100 y 290K. Las propiedades estructurales y morfológicas se estudiaron mediante estudios de difracción de rayos-X (XRD) y microscopía electrónica de barrido (SEM), respectivamente. El coeficiente Seebeck es negativo en todo el rango de temperatura estudiado, indicando una conducción dada por portadores de carga negativos, su magnitud disminuye con el contenido de lantano desde $|-261| \mu V/K$ hasta $|-120| \mu V/K$. La resistividad eléctrica muestra un comportamiento de carácter semiconductor, descrito mediante un mecanismo tipo hopping de pequeños polarones. Las propiedades termoeléctricas de los compuestos obtenidos se evaluaron a través de

su factor de potencia termoeléctrico PF , el cual alcanza valores máximos cercanos a $2 \mu\text{W}/\text{K}^2\text{cm}$, estos valores permiten considerar esta familia de compuestos como posibles materiales útiles en aplicaciones termoeléctricas.

Palabras clave: Materiales termoeléctricos, compuestos CaLaMnO , propiedades de transporte.

Abstract

By using the solid state reaction method samples of $\text{Ca}_{1-x}\text{La}_x\text{MnO}_3$ ($0 \leq x \leq 0.15$) were prepared. Their transport properties were studied by electrical resistivity $\rho(T)$ and Seebeck coefficient $S(T)$ measurements as a function of temperature and lanthanum content, in the temperature range between 100 and 290K. The structural and morphological properties were studied by X-ray diffraction analysis (XRD) and scanning electron microscopy (SEM), respectively. The Seebeck coefficient is negative throughout the studied temperature range indicating a conduction given by negative charge carriers, its magnitude decreases with the lanthanum content from $|-261| \mu\text{V}/\text{K}$ to $|-120| \mu\text{V}/\text{K}$. The electrical resistivity shows a semiconducting behavior, it was interpreted in terms of small polaron hopping model. Thermoelectric properties of the obtained compounds were studied by the thermoelectric power factor PF , which reaches maximum values around $2 \mu\text{W}/\text{K}^2\text{cm}$, these values become this kind of ceramics promising thermoelectric compound, to be used in technological applications.

Keywords: Thermoelectric materials, $\text{Ca}(\text{La})\text{MnO}$ compounds, transport properties.

Introducción

El rápido deterioro del medio ambiente ha incrementado la motivación por estudiar alternativas no convencionales para la generación de energía eléctrica.

Los materiales termoeléctricos son una alternativa posible en cuanto que permiten la transformación directa de energía térmica en

eléctrica y viceversa, lo cual da lugar a la generación de energía eléctrica útil a partir de fuentes de calor residual, así como a el diseño de sistemas de refrigeración de estado sólido.

Los materiales actualmente utilizados en aplicaciones comerciales, se pueden clasificar según su rango de temperatura de operación. Esta dependencia con la temperatura es uno de los problemas existentes, pues cada material tiene un rango de temperatura angosto en el cual sus propiedades de transporte son óptimas. Las aleaciones de bismuto con telurio o selenio (Bi_2Te_3 y Bi_2Se_3), se les considera como materiales de baja temperatura y se utilizan principalmente a temperaturas inferiores a 450K en la fabricación de refrigeradores de estado sólido, utilizados en aplicaciones domésticas simples y en la refrigeración de circuitos electrónicos. Los máximos valores alcanzados por su figura de merito son cercanas a $2.0 \times 10^{-3} K^{-1}$.

En el rango de temperaturas intermedias, (hasta temperaturas cercanas a 850K), los dispositivos más utilizados son fabricados a partir de aleaciones de plomo ($PbTe$ y $PbTe_{1-x}Se_x$). Mientras que los termoelementos empleados a altas temperaturas son fabricados a base de aleaciones de bismuto-germanio y silicio-germanio, estos tienen temperaturas máximas de operación cercanas a 1300K, estas aplicaciones se relacionan con generadores eléctricos para potenciar naves destinadas a la exploración espacial. En general, se puede decir que los dispositivos basados en materiales termoeléctricos se utilizan en aplicaciones donde la confiabilidad y versatilidad son más importante que la economía.

Aunque estos materiales son empleados en aplicaciones prácticas de generación y refrigeración, significativos esfuerzos se realizan actualmente buscando la síntesis y caracterización de nuevos materiales, así, como la optimización de estructuras conducentes al mejoramiento de su desempeño termoeléctrico.

Desde mediados de los años ochenta se ha incrementado el estudio de este tipo de materiales, a raíz del desarrollo de nuevas teorías y métodos de preparación los cuales permiten la manipulación del transporte electrónico y fonónico tanto en complejas estructuras cristalinas como en sistemas de baja dimensionalidad[1].

Teniendo en cuenta tanto su estabilidad química como sus

propiedades de transporte, entre los materiales termoeléctricos actualmente estudiados se encuentran algunos óxidos cerámicos, los cuales pueden operar en un amplio rango de temperatura, lo cual hace parte de los problemas presentados por los materiales termoeléctricos convencionalmente utilizados[1].

Para el desarrollo de dispositivos termoeléctricos es necesario contar con materiales tipo P y tipo N , con propiedades de transporte similares, sin embargo, la mayoría de óxidos cerámicos muestran un transporte eléctrico mediante huecos, por lo tanto es de gran importancia identificar y caracterizar cerámicas tipo N , lo cual permitiría el diseño de dispositivos termoeléctricos a partir de materiales cerámicos.

Particularmente, los compuestos de la forma $A_{1-x}L_xMnO_3$ (siendo A un catión divalente alcalino y L un catión trivalente o tierra rara), han mostrado una respuesta satisfactoria como materiales termoeléctricos debido a sus interesantes propiedades de transporte. Más específicamente, diversas fases de la perovskita $CaMnO_3$ se han estudiado, explorando sustituciones catiónicas, y determinando sus propiedades físicas, químicas, ópticas y termoeléctricas[2, 3].

En este trabajo se presenta un estudio de las propiedades termoeléctricas y de transporte del compuesto $Ca_{1-x}La_xMnO_3$, a partir de mediciones de resistividad eléctrica y coeficiente Seebeck, en función de la temperatura y el contenido de lantano, a fin de evaluar su posible utilización como termoelementos tipo N , en dispositivos termoeléctricos.

Procedimiento Experimental

Utilizando el método de reacción de estado sólido se prepararon muestras del compuesto $Ca_{1-x}La_xMnO_3$ ($0 \leq x \leq 0.15$) a partir de una mezcla estequiométrica de los compuestos: $CaCO_3$, La_2O_3 y MnO_2 en polvo de alta pureza (Merck 99.99 %).

La mezcla obtenida se sometió sucesivamente a tres tratamientos térmicos. Durante el primero de ellos su temperatura se incrementó hasta $950^\circ C$, la cual se mantuvo durante 12 horas, para luego descender libremente hasta la temperatura ambiente. El material obtenido fue macerado y empastillado bajo una presión aproximada de $283 MPa$. Durante el segundo tratamiento térmico

las muestras se trataron a 950°C durante 24 horas, luego de las cuales se sometieron a un proceso de enfriamiento controlado hasta temperatura ambiente. Finalmente, se repiten los procesos de macerado y empastillado bajo una presión aproximada de 566 MPa . En este tratamiento la temperatura se mantuvo 24 horas a 1100°C , para luego descender controladamente hasta la temperatura ambiente. Los dos últimos procesos se llevaron a cabo en una atmósfera rica en oxígeno.

Las mediciones de la resistividad eléctrica se realizaron utilizando el método lineal de cuatro puntas[4], mientras que el coeficiente Seebeck se midió empleando el método *íntegro-diferencial*[5]. Estas propiedades de transporte se midieron en el rango de temperatura entre 100 y 290K. Las propiedades estructurales se estudiaron mediante análisis de difracción de rayos-X, donde los patrones de difracción se obtuvieron a temperatura ambiente, utilizando un equipo *X Pert Pro MPD PANalitical*, con geometría *Bragg-Brettano* y radiación $\text{CuK}_\alpha(1.54056\text{ \AA})$, con un paso de 0.02° y un tiempo de exposición de 10 segundos. Las propiedades morfológicas se estudiaron a partir de análisis de microscopía electrónica de barrido (*SEM*).

Resultados

En la figura 1 se muestran los difractogramas experimentales, junto con la simulación obtenida mediante un refinamiento Rietveld. Todas las muestras exhiben una fase única y una estructura cristalina de carácter ortorrómbica ($\text{Pnma S.G. N}^\circ 62$), donde el contenido de lantano da lugar a un aumento en los parámetros de red del cristal y por ende en el aumento del volumen de la celda unitaria (ver tabla 1).

En este estudio el “background” fue modelado utilizando una función polinomial de cinco términos, la forma de los picos se describió mediante una función de tipo pseudo-Voigt. En la tabla 2 se muestran los parámetros de ajuste obtenidos durante el proceso de refinamiento.

Los análisis de microscopía electrónica de barrido muestran el comportamiento de la estructura granular donde es posible ver que el tamaño de grano y el espacio intergranular decrecen con el

contenido de lantano lo cual sugiere un incremento en la densidad y homogeneidad del material (ver Figura 2).

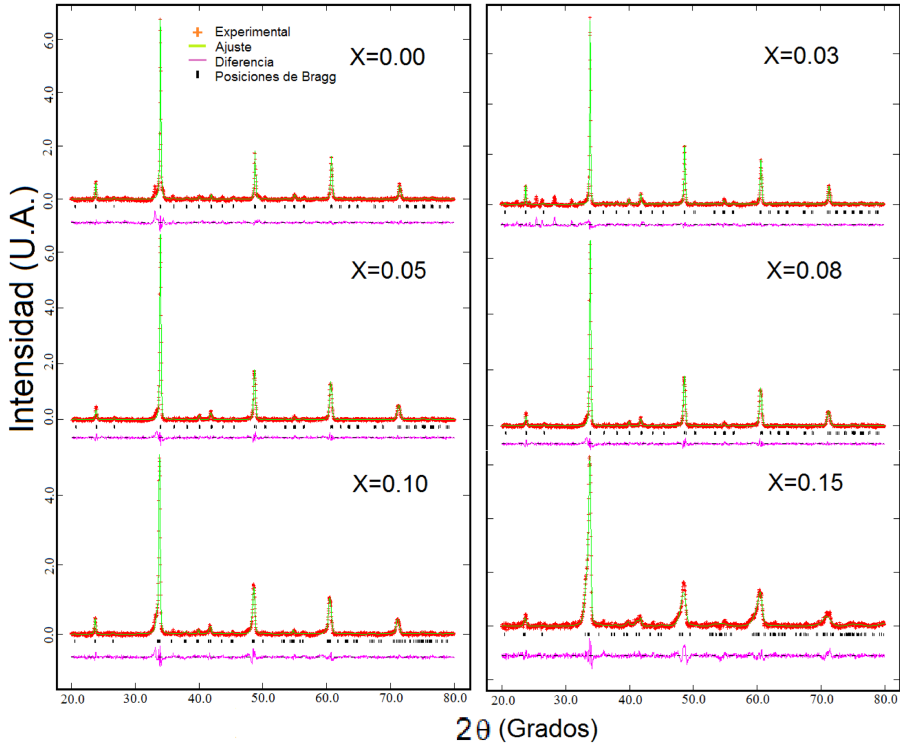


FIGURA 1. Patrones de difracción de rayos-X del compuesto $Ca_{1-x}La_xMnO_3$ para diferentes niveles de lantano.

| Contenido de La | a (Å) | b (Å) | c(Å) | V (Å) ³ |
|-----------------|-----------|-----------|-----------|--------------------|
| $La = 0.00$ | 5.2881(6) | 7.4695(4) | 5.2836(3) | 208.70(1) |
| $La = 0.03$ | 5.2987(6) | 7.4760(5) | 5.2874(3) | 209.45(2) |
| $La = 0.05$ | 5.3010(6) | 7.4780(4) | 5.2889(3) | 209.45(2) |
| $La = 0.08$ | 5.3012(4) | 7.4699(3) | 5.2877(3) | 209.39(2) |
| $La = 0.10$ | 5.3431(5) | 7.4935(3) | 5.2913(3) | 211.86(2) |
| $La = 0.15$ | 5.4126(9) | 7.5365(9) | 5.2913(3) | 217.00(6) |

TABLA 1. Parámetros de red obtenidos para el compuesto $Ca_{1-x}La_xMnO_3$ con diferentes concentraciones de lantano.

| Contenido de La | 0.0 | 0.03 | 0.05 | 0.08 | 0.10 | 0.15 |
|-----------------|------|------|------|------|------|------|
| R_{WP} | 6.22 | 6.12 | 6.03 | 5.89 | 5.98 | 6.13 |
| R_B | 3.38 | 3.35 | 3.85 | 3.46 | 3.47 | 3.62 |
| χ^2 | 1.23 | 1.56 | 1.42 | 1.68 | 1.59 | 1.89 |

TABLA 2. *Parámetros de ajuste obtenidos en el refinamiento Rietveld de $\text{Ca}_{1-x}\text{La}_x\text{MnO}_3$ con diferentes concentraciones de lantano.*

El comportamiento del coeficiente Seebeck con la temperatura y el contenido de lantano se muestra en la figura 3. $S(T)$ es negativo en todo el rango de temperatura estudiado, indicando una conducción dada por portadores de carga negativos. Su magnitud disminuye con el contenido de lantano, lo cual evidencia un aumento en la densidad de portadores de carga presentes en el compuesto. Es importante notar que el coeficiente Seebeck presenta un comportamiento decreciente con la temperatura, sin embargo esta tendencia tiende a desaparecer a medida que aumenta el contenido de lantano, hasta alcanzar un comportamiento prácticamente independiente de la temperatura. A la vez que disminuye el comportamiento decreciente con la temperatura, se da lugar a la aparición progresiva de una dependencia proporcional con esta, en la región de bajas temperaturas.

Los mecanismos de dispersión están relacionados con el comportamiento de los acoplamiento entre granos y las impurezas de carácter químico, sin embargo es importante notar que uno de los principales efectos de la inclusión de lantano es el incremento de la localización, y el incremento del desorden estructural producto de la sustitución de La^{3+} por Ca^{2+} , lo cual se evidencia en la tendencia a la independencia de $S(T)$ con aumento del nivel de dopado con La.

En este tipo de óxidos el coeficiente Seebeck se puede interpretar en términos del modelo propuesto por Heikes para compuestos altamente correlacionados, según el cual $S(T)$ está dado por la siguiente expresión[6, 7]:

$$S - S_0 \approx -\frac{k_B}{e} \ln \left[\frac{1-n}{n} \right] \approx \frac{E_g}{2eT}, \quad (1)$$

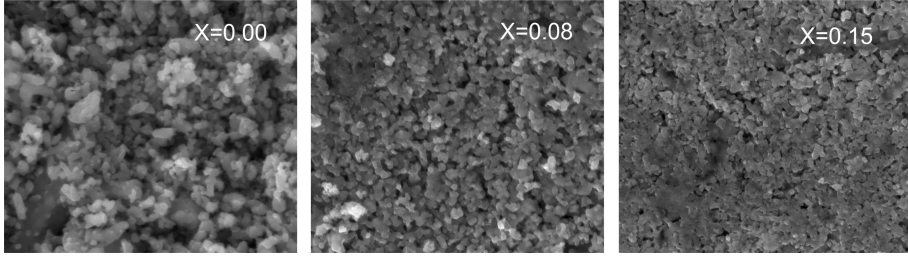


FIGURA 2. Micrografías obtenidas mediante microscopía electrónica de barrido para el compuesto $Ca_{1-x}La_xMnO_3$.

donde k_B es la constante de Boltzmann, e la carga electrónica, E_g la energía del gap, T la temperatura absoluta y n es la densidad de portadores de carga por sitio.

A partir del ajuste de los datos experimentales al modelo propuesto por Heikes (líneas sólidas en la figura 3), fue posible obtener los valores de la energía del gap (E_g) para cada una de las muestras estudiadas. Los valores obtenidos para E_g se muestran en la tabla 3. Como se puede apreciar, E_g decrece con el nivel de lantano, evidenciando un incremento del comportamiento metálico de los compuestos generado por un aumento en la densidad de portadores de carga.

El comportamiento observado en la región de bajas temperaturas en las muestras con concentraciones de lantano mayores que 0.05 puede originarse por la aparición de un mecanismo de conducción tipo hopping entre estados localizados en el gap. Mientras que el comportamiento independiente de la temperatura observado en la muestra altamente dopada es típico de una conducción dada por hopping correlacionado en sistemas interactuantes fuertemente correlacionados[8].

En la figura 4 se muestra el comportamiento de la resistividad eléctrica en función de la temperatura para cada una de las muestras en estudio, donde se puede observar el carácter semiconductor del compuesto. La magnitud de $\rho(T)$ decrece con el contenido de lantano, lo cual está de acuerdo con el decrecimiento observado tanto en la magnitud de $S(T)$, así como con el comportamiento encontrado anteriormente para la energía del gap.

| Nivel de La | 0.05 | 0.08 | 0.10 | 0.15 |
|-------------------|----------|----------|----------|---------|
| $E_g(\text{meV})$ | 21.95(3) | 22.93(1) | 16.65(2) | 5.13(2) |

TABLA 3. Energía del gap para diferentes concentraciones de lantano.

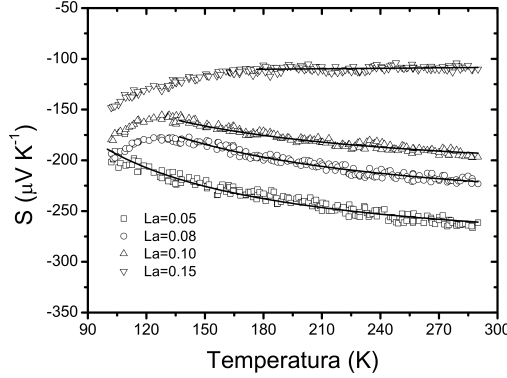


FIGURA 3. Valores obtenidos del coeficiente Seebeck en función de la temperatura para distintos niveles de lantano.

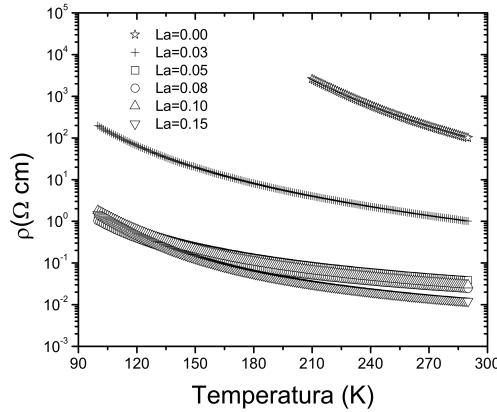


FIGURA 4. Comportamiento de la resistividad eléctrica en función de la temperatura y el contenido de lantano.

La resistividad eléctrica en un régimen de hopping de pequeños polarones en un material que contiene óxidos de metales de transición puede describirse mediante la siguiente expresión[9–11]:

$$\rho = CT e^{\frac{E_A}{k_B T}}, \quad (2)$$

donde k_B es la constante de Boltzmann, E_A es la energía de activación y C es una constante cuyo valor es posible expresarlo como:

$$C = \frac{k_B}{Nc(1-c)q^2a^2\nu}, \quad (3)$$

siendo N , c , q , a y ν la concentración de sitios posibles, la fracción de sitios ocupados, la carga eléctrica, la distancia de hopping y la frecuencia vibracional, respectivamente. Ajustando los datos experimentales a este modelo mediante la gráfica de $\ln(\rho/T)$ vs. $1/T$, fue posible determinar la energía de activación (E_A) y el valor de la constante C para cada compuesto (ver figura 5). Este análisis muestra que tanto la E_A como el valor de C disminuyen con el contenido de lantano como puede apreciarse en la tabla 4.

El decrecimiento en la energía de activación está asociado al aumento de la densidad de portadores de carga, lo cual es responsable tanto del decrecimiento de la magnitud de $S(T)$ como del comportamiento semiconductor de los compuestos. Adicionalmente al incremento de la densidad de portadores, la reducción en la magnitud de la constante C puede estar gobernada por un incremento en la distancia hopping teniendo en cuenta que el radio iónico de los átomos de lantano es más grande que el de los átomos de calcio, entonces es altamente posible que la distancia entre sitios de hopping se incremente con el contenido de lantano.

| Contenido de La | $E_A(\text{meV})$ | $C(10^{-5})(\Omega\text{cmK}^{-1})$ |
|-----------------|-------------------|-------------------------------------|
| $La = 0.00$ | 234.9(1) | 2.92 |
| $La = 0.03$ | 84.9(1) | 1.58 |
| $La = 0.05$ | 62.5(2) | 1.22 |
| $La = 0.08$ | 63.4(1) | 0.73 |
| $La = 0.10$ | 68.4(2) | 0.70 |
| $La = 0.15$ | 78.5(1) | 0.71 |

TABLA 4. Energía de activación obtenida a partir del modelo de hopping de pequeños polarones.

La eficiencia de un material termoelectrico es comúnmente determinada a través de su figura de mérito, la cual depende de

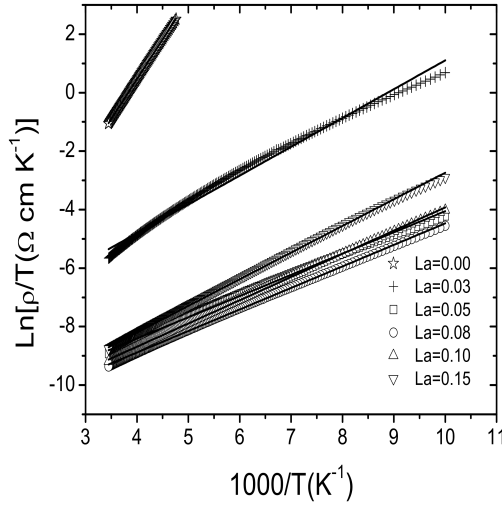


FIGURA 5. Relación entre $\ln\left(\frac{\rho}{T}\right)$ y $\frac{1}{T}$ para cada una de las muestras estudiadas.

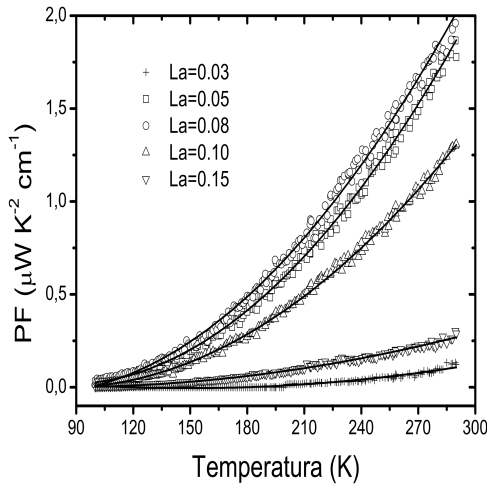


FIGURA 6. Factor de Potencia termoeléctrico ($PF = S^2/\rho$) en función de la temperatura para muestras de $\text{Ca}_{1-x}\text{La}_x\text{MnO}_3$.

la temperatura y de las propiedades de transporte del material, este parámetro de rendimiento se define como[1, 12]:

$$ZT = \frac{S^2 T}{\rho \kappa}, \quad (4)$$

donde S , T , ρ y κ son el coeficiente Seebeck, la temperatura absoluta, la resistividad eléctrica y la conductividad térmica total,

respectivamente. El factor de potencia termoeléctrico (PF) es igualmente un parámetro de rendimiento dado por las propiedades eléctricas del material, el cual depende de la movilidad y la masa efectiva de los portadores de carga. Este parámetro hace parte de la figura de mérito y está dado por la expresión[1, 13]:

$$PF = \frac{S^2}{\rho}. \quad (5)$$

Así, altos valores para el factor de potencia y baja conductividad térmica son propiedades deseables en todo material termoeléctrico[1, 14].

A partir de las mediciones de $S(T)$ y $\rho(T)$ fue posible determinar el factor de potencia en función de la temperatura (ver Figura 6). Aquí se evidencia el aumento de PF con la temperatura y el contenido de lantano, alcanzando máximos valores cercanos a $2 \mu W K^{-2} cm^{-1}$, en el caso de la muestra con $x = 0.08$. Este resultado convierte esta familia de compuestos en potenciales materiales termoeléctricos, sin embargo, es necesario optimizar sus propiedades de transporte mediante la modificación sistemática de su estructura química.

Conclusiones

Utilizando el método de reacción de estado sólido fue posible preparar muestras monofásicas del compuesto $Ca_{1-x}La_xMnO_3$, las cuales exhiben una estructura cristalina de carácter ortorrómbica. El coeficiente Seebeck es negativo en todo el rango de temperatura estudiado, sugiriendo una conducción dada por portadores de carga negativos y su magnitud decrece con el contenido de lantano. El comportamiento de la resistividad eléctrica es de carácter semiconductor, tomando valores mínimos cercanos a $0.01 \Omega cm$. A partir de las mediciones de coeficiente Seebeck y resistividad eléctrica se calculó el factor de potencia termoeléctrico el cual alcanza valores máximos cercanos a $2 \mu W K^{-2} cm^{-1}$ a temperatura ambiente, en el caso de la muestra con $x = 0.08$. Estos resultados convierten esta familia de compuestos en potenciales materiales con aplicaciones termoeléctricas.

Agradecimientos

Este trabajo fue soportado por la *División de Investigación de la Universidad Nacional de Colombia, sede Bogotá (DIB)*.

Referencias

- [1] J. E. Rodríguez, *Rev. Acad. Colombiana de Ciencias* **121**, 545 (2007).
- [2] E. Mostovshchikova, N. Loshkareva, B. Gizhevskii, N. Solin, and A. Balbashov, *J. Magn. Magn. Mater.* **300**, e147 (2006).
- [3] M. E. Melo Jorge, M. R. Nunes, R. Silva Maria, and D. Sousa, *Chem. Mater.* **17**, 2069 (2005).
- [4] W. Runyan, *Semiconductor Measurements and Instrumentation*, Electronics series (McGraw-Hill, 1975).
- [5] J. E. Rodríguez and A. Mariño, *Rev. Col. Fis.* **24**, 21 (1992).
- [6] J. F. Kwak, G. Beni, and P. M. Chaikin, *Phys. Rev. B* **13**, 641 (1976).
- [7] R. Laiho, K. G. Lisunov, E. Lähderanta, V. N. Stamov, and V. S. Zakhvalinskii, *J. Phys. Condens. Mat.* **13**, 1233 (2001).
- [8] R. Wandekar, B. Wani, and S. Bharadwaj, *Solid State Sci.* **11**, 240 (2009).
- [9] S. Li, R. Funahashi, I. Matsubara, K. Ueno, S. Sodeoka, and H. Yamada, *Chem. Mater.* **12**, 2424 (2000).
- [10] R. Kabir, R. Tian, T. Zhang, R. Donelson, T. T. Tan, and S. Li, *J. Alloy. Compd.* **628**, 347 (2015).
- [11] R. Kabir, D. Wang, T. Zhang, R. Tian, R. Donelson, T. T. Tan, and S. Li, *Ceram. Int.* **40**, 16701 (2014).
- [12] D. Rowe, *CRC Handbook of Thermoelectrics* (CRC Press, 1995).
- [13] M. Scott and E. Doreen, *Am. Ceram. Soc. Bull.* **9**, 24 (2012).
- [14] W. Liu, X. Yan, G. Chen, and Z. Ren, *Nano Energy* **1**, 42 (2012).

PREFERENTIAL SOLVATION OF L-ARABINOSE AND DL-MALIC ACID IN ETHANOL + WATER MIXTURES

SOLVATACIÓN PREFERENCIAL DE L-ARABINOSA Y ÁCIDO DL-MÁLICO EN MEZCLAS ETANOL + AGUA

Zaira J. Cárdenas, Daniel M. Jiménez, Fleming Martínez

Grupo de Investigaciones Farmacéutico, Departamento de Farmacia, Facultad de Ciencias,
Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

(Recibido: Octubre/2016. Aceptado: Diciembre/2016)

Abstract

By using the inverse Kirkwood-Buff integrals (IKBI) method, the differences between the local, around the solute and the bulk mole fractions of both solvents in saturated solutions of L-arabinose (compound 3) and DL-malic acid (compound 3) in ethanol (compound 1)+ water (compound 2) binary mixtures were derived from their thermodynamic properties. Accordingly, it is found that these compounds are sensitive to preferential solvation effects; in this way, the preferential solvation parameter ($\delta x_{1,3}$) for L-arabinose is slightly positive in water-rich mixtures but negative in those beyond 0.25 in ethanol mole fraction. In different way, the $\delta x_{1,3}$ values of DL-malic acid are negative in almost all the compositions. The highest solvation by ethanol observed in water-rich mixtures for L-arabinose could be due mainly to polarity effects. Otherwise, the preference of these compounds for water in ethanol-rich mixtures could be explained in terms of the higher acidic behavior of water interacting with hydrogen-acceptor hydroxyl groups in L-arabinose and DL-malic acid.

Keywords: L-arabinose, DL-malic acid, ethanol, solubility, IKBI, preferential solvation.

Resumen

Utilizando algunas propiedades termodinámicas clásicas de disolución se calcularon los parámetros de solvatación preferencial ($\delta x_{1,3}$) de L-arabinosa y ácido DL-málico en mezclas etanol + agua mediante el método de las integrales inversas de Kirkwood-Buff (IKBI, por sus siglas en inglés); estos parámetros $\delta x_{1,3}$ corresponden a las diferencias entre las fracciones molares locales alrededor del soluto y en el grueso de la solución. Se observó que estos compuestos son sensibles a efectos específicos de solvatación según la composición de la mezcla cosolvente. Así, los valores de $\delta x_{1,3}$ para la L-arabinosa son positivos en mezclas ricas en agua pero negativos en composiciones desde 0,25 en fracción molar de etanol hasta el etanol puro. Sin embargo, en el caso del ácido DL-málico los valores de $\delta x_{1,3}$ son negativos en todas las composiciones cosolventes analizadas. En mezclas ricas en agua la mayor solvatación de la L-arabinosa por parte de las moléculas de etanol podría deberse principalmente a efectos de polaridad. De otro lado, la preferencia que manifiestan ambos compuestos por el agua en mezclas ricas en etanol, podría explicarse en términos de la mayor acidez del agua, la cual estaría interactuando con los grupos aceptores de hidrógeno presentes en los dos solutos.

Palabras clave: L-arabinosa, ácido DL-málico, etanol, solubilidad, IKBI, solvatación preferencial.

Introduction

L-Arabinose (also known as pectinose, $C_5H_{10}O_5$, molar mass 150.13 g mol⁻¹, CAS number 147-81-9, Fig. 1-B is a monosaccharide including an aldehyde functional group found in hemicelluloses and pectin [1]. DL-Malic acid (Hydroxybutanedioic acid, $C_4H_6O_5$, molar mass 134.09 g mol⁻¹, CAS number 617-48-1, Fig. 1-C) is a hydroxy-dicarboxylic organic acid present in several fruits and commonly used as food additive [1]. In the industrial manufacture of L-arabinose and DL-malic acid, these compounds are purified through crystallization from diluted or concentrated solutions as the

final step. In this way, aqueous alcoholic mixtures are widely used with this purpose. Because the knowledge about the equilibrium solubility is a crucial factor for crystallization processes Jiang et al. [2] and Yuan et al. [3] studied, respectively, the solubility of L-arabinose and DL-malic acid in several ethanol + water mixtures at different temperatures.

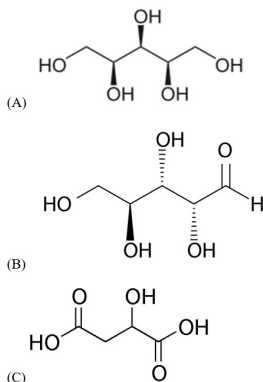


FIGURE 1. Molecular structure of xylitol (A), L-arabinose (B), and DL-malic acid (C).

Considering that the cosolvency or solvent blending has been employed for a long time to increase or decrease the solubility of organic compounds [4, 5], which is a desired effect to optimize the crystallization processes of solutes, a deep physical-chemical approach of the mechanisms involved in solubilization and/or desolubilization processes, including preferential solvation [6, 7], regains significance.

Regarding thermodynamic studies, some recent researches have been published based on the enthalpic and entropic contributions to the Gibbs energy of solution of these organic hydroxyl-compounds [3, 4]. Nevertheless, the preferential solvation, i.e. the cosolvent specific composition around L-arabinose and DL-malic acid molecules has not been studied. Therefore, the main goal of this research is to evaluate the preferential solvation of these compounds in ethanol + water cosolvent mixtures, based on some classical thermodynamic definitions [8, 9]. L-Arabinose and DL-malic acid were chosen as model solutes for this research owing their multiple pharmaceutical and chemical applications. Thus, this work is very

similar to that presented previously in the literature for the preferential solvation of the sweetening agent xylitol (Fig. 1-A) in similar cosolvent mixtures [10].

Theoretical Background

The Kirkwood-Buff integrals (KBIs, $G_{i,S}$) are given by the following expression:

$$G_{i,S} = \int_0^{r_{cor}} (g_{i,S} - 1)4\pi r^2 dr \quad (1)$$

Here $g_{i,S}$ is the pair correlation function for the molecules of the solvent i in cosolvent mixtures around the solute (S), r the distance between the centers of the molecules of solute and solvent components, and r_{cor} is a correlation distance for which $g_{i,S}(r > r_{cor}) \approx 1$. The results are expressed in terms of the preferential solvation parameter $\delta x_{i,S}$ for the solute in the saturated solutions by the component solvents, i.e. ethanol and water [11]. For solvation of L-arabinose (component 3) or DL-malic acid (component 3), this parameter is defined for ethanol (component 1) as:

$$\delta x_{1,3} = x_{1,3}^L - x_1 = -\delta x_{2,3} \quad (2)$$

Where x_1 is the mole fraction of ethanol in the bulk solvent mixture and $x_{1,3}^L$ is the local mole fraction of ethanol in the environment near to the solute. If $\delta x_{1,3} > 0$ the solute is preferentially solvated by ethanol; on the contrary, if it is < 0 the solute is preferentially solvated by water, within the correlation volume ($V_{cor} = (4\pi/3)r_{cor}^3$) and the bulk mole fraction of ethanol, x_1 . Values of $\delta x_{1,3}$ are calculable from those of $G_{1,3}$ and $G_{2,3}$, which are obtained from thermodynamic data of the cosolvent mixtures with and without the solute dissolved on them [8].

Mathematical manipulation of the basic expressions reported by Newman [11] leads to practical expressions for the Kirkwood-Buff integrals (expressed in $\text{cm}^3 \text{ mol}^{-1}$) for the individual solvent components as shown in equations 3 and 4 [6, 7]:

$$G_{1,3} = RT\kappa_T - V_3 + x_2 V_2 D/Q \quad (3)$$

$$G_{2,3} = RT\kappa_T - V_3 + x_1 V_1 D/Q \quad (4)$$

Here κ_T is the isothermal compressibility of the ethanol + water solvent mixtures (expressed in GPa^{-1}), V_1 and V_2 are the partial molar volumes of the solvents in the mixtures (expressed in $\text{cm}^3 \text{mol}^{-1}$), and similarly, V_3 is the partial molar volume of the solute L-arabinose or DL-malic acid in these cosolvent mixtures (expressed in $\text{cm}^3 \text{mol}^{-1}$). The function D is the derivative of the standard molar Gibbs energies of transfer of the solute from neat water to ethanol + water mixtures regarding to the ethanol proportion in the mixtures (expressed in kJ mol^{-1} , as also is RT). The function Q involves the second derivative of the excess molar Gibbs energy of mixing of both solvents (G_{1+2}^{Exc}) in function of the water proportion in the mixtures (also expressed in kJ mol^{-1}) [6, 7]. Thus, functions D and Q are defined as:

$$D = \left(\frac{\partial \Delta_{tr} G_{3,2 \rightarrow 1+2}^{\circ}}{\partial x_1} \right)_{T,p} \quad (5)$$

$$Q = RT + x_1 x_2 \left(\frac{\partial^2 G_{1+2}^{Exc}}{\partial x_2^2} \right)_{T,p} \quad (6)$$

Ben-Naim [12] demonstrated that the preferential solvation parameter can be calculated from the Kirkwood-Buff integrals as follows:

$$\delta x_{1,3} = \frac{x_1 x_2 (G_{1,3} - G_{2,3})}{x_1 G_{1,3} + x_2 G_{2,3} + V_{cor}} \quad (7)$$

The correlation volume (V_{cor}) is commonly obtained by means of the following expression [6, 7]:

$$V_{cor} = 2522.5 (r_3 + 0.1363(x_{1,3}^L V_1 + x_{2,3}^L V_2))^{1/3} - 0.085)^3 \quad (8)$$

Here r_3 is the molecular radius of the solute (expressed in nm) and may be calculated from the molar volume by using the Avogadro number (N_{Av}) as:

$$r_3 = \left(\frac{3 \times 10^{21} V_3}{4\pi N_{Av}} \right)^{1/3} \quad (9)$$

However, the definitive correlation volume requires iteration because it depends on the local mole fractions. This iteration is performed by replacing $\delta x_{1,3}$ in the equation 2 to calculate $x_{1,3}^L$ until a non-variant value of V_{cor} is obtained.

Results and Discussion

Standard molar Gibbs energy of transfer of these organic compounds from neat water to ethanol + water mixtures was calculated and correlated to regular third degree polynomials from the drug solubility data taken from [2, 3] by using equation 10. Table 1 and Fig. 2 show the Gibbs energy of transfer behavior at all the temperatures studied. Temperatures from 293.15 to 313.15 K were considered owing the thermodynamic quantities required for IKBI calculations have been reported in this range [10, 13]. The respective polynomial coefficients are shown in Table 2.

$$\Delta_{tr}G_{3,2 \rightarrow 1+2}^{\circ} = RT \ln \left(\frac{x_{3,2}}{x_{3,1+2}} \right) = a + bx_1 + cx_1^2 + dx_1^3 \quad (10)$$

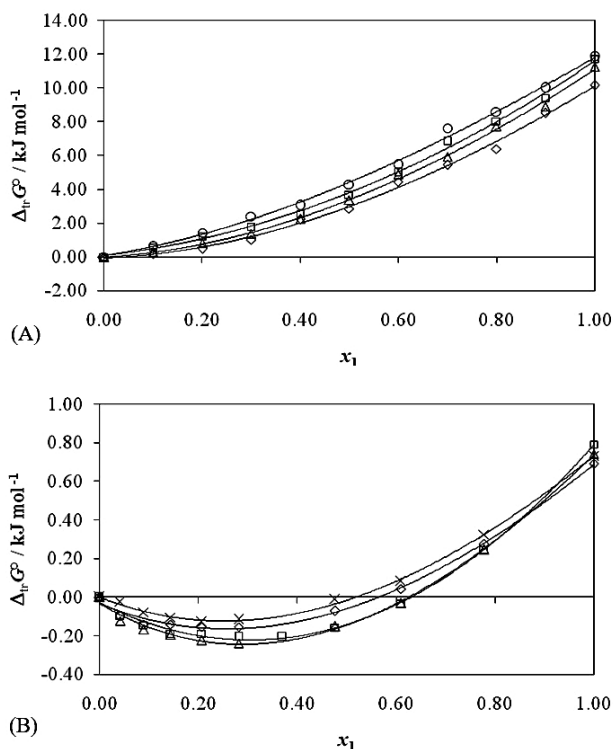


FIGURE 2. Gibbs energy of transfer of *L*-arabinose (A) and *DL*-malic acid (B) from neat water (2) to ethanol (1) + water (2) mixtures at several temperatures. \circ : 293.15 K, \square : 298.15 K, \triangle : 303.15 K, \diamond : 308.15 K, \times : 313.15 K.

| L-arabinose ^a | | | | | DL-Malic acid ^b | | | | |
|--------------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|----------------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| x_1 ^c | 293.15 K | 298.15 K | 303.15 K | 308.15 K | x_1 | 298.15 K | 303.15 K | 308.15 K | 313.15 K |
| 0.000 | 7.36 | 7.32 | 7.27 | 7.29 | 0.000 | 4.70 | 4.60 | 4.42 | 4.24 |
| 0.042 | 8.03 | 7.87 | 7.58 | 7.46 | 0.100 | 4.61 | 4.48 | 4.32 | 4.22 |
| 0.089 | 8.78 | 8.53 | 8.07 | 7.78 | 0.200 | 4.56 | 4.44 | 4.28 | 4.16 |
| 0.144 | 9.75 | 9.11 | 8.64 | 8.32 | 0.300 | 4.51 | 4.41 | 4.28 | 4.14 |
| 0.207 | 10.39 | 9.88 | 9.51 | 9.51 | 0.400 | 4.51 | 4.38 | 4.27 | 4.11 |
| 0.281 | 11.64 | 11.01 | 10.65 | 10.15 | 0.500 | 4.50 | 4.36 | 4.27 | 4.13 |
| 0.370 | 12.79 | 12.31 | 12.15 | 11.74 | 0.600 | 4.50 | 4.50 | 4.37 | 4.23 |
| 0.477 | 14.98 | 14.15 | 13.20 | 12.73 | 0.700 | 4.54 | 4.45 | 4.35 | 4.23 |
| 0.610 | 15.95 | 15.34 | 14.98 | 13.68 | 0.800 | 4.67 | 4.57 | 4.47 | 4.32 |
| 0.779 | 17.36 | 16.74 | 16.16 | 15.79 | 0.900 | 4.95 | 4.85 | 4.70 | 4.57 |
| 1.000 | 19.21 | 19.05 | 18.52 | 17.44 | 1.000 | 5.49 | 5.34 | 5.11 | 4.97 |

^a Calculated from solubility values reported by Jiang et al. [2].

^b Calculated from solubility values reported by Yuan et al. [3].

^c x_1 is the mole fraction of ethanol (1) in ethanol (1) + water (2) mixtures free of solute.

TABLE 1. *Gibbs energy of transfer (kJ mol^{-1}) of L-arabinose (3) and DL-malic acid (3) from neat water (2) to ethanol (1) + water (2) mixtures at several temperatures.*

| x_1 ^a | L-arabinose | | | | DL-Malic acid | | | |
|--------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|---------------|-------------|-------------|-------------|
| | 293.15 K | 298.15 K | 303.15 K | 308.15 K | 298.15 K | 303.15 K | 308.15 K | 313.15 K |
| 0.000 | 4.41 | 3.26 | 1.72 | 1.18 | -1.27 | -1.52 | -1.05 | -1.00 |
| 0.100 | 6.28 | 4.95 | 3.85 | 3.25 | -0.85 | -0.96 | -0.62 | -0.59 |
| 0.200 | 8.00 | 6.63 | 5.88 | 5.21 | -0.43 | -0.44 | -0.22 | -0.19 |
| 0.300 | 9.58 | 8.30 | 7.83 | 7.09 | -0.02 | 0.05 | 0.16 | 0.18 |
| 0.400 | 11.02 | 9.95 | 9.69 | 8.86 | 0.40 | 0.51 | 0.51 | 0.52 |
| 0.500 | 12.32 | 11.59 | 11.45 | 10.54 | 0.82 | 0.92 | 0.83 | 0.83 |
| 0.600 | 13.48 | 13.22 | 13.13 | 12.13 | 1.24 | 1.30 | 1.13 | 1.13 |
| 0.700 | 14.49 | 14.83 | 14.71 | 13.62 | 1.65 | 1.65 | 1.40 | 1.39 |
| 0.800 | 15.37 | 16.43 | 16.20 | 15.02 | 2.07 | 1.96 | 1.64 | 1.63 |
| 0.900 | 16.10 | 18.01 | 17.60 | 16.32 | 2.49 | 2.23 | 1.86 | 1.85 |
| 1.000 | 16.69 | 19.58 | 18.92 | 17.52 | 2.91 | 2.46 | 2.05 | 2.04 |

^a x_1 is the mole fraction of ethanol (1) in ethanol (1) + water (2) mixtures free of solute.

TABLE 2. *Coefficients of the Equation [16] (kJ mol^{-1}) applied to Gibbs energy of transfer of L-arabinose (3) and DL-malic acid (3) in ethanol (1) + water (2) mixtures at several temperatures.*

D values were calculated from the first derivative of polynomial models solved according to the cosolvent mixtures composition. This procedure was performed varying by 0.05 in mole fraction of ethanol but in the following tables the respective values are

reported varying only by 0.10 to save space in the article. D values are reported in Table 3.

| x_1 ^a | L-arabinose | | | | DL-Malic acid | | | |
|--------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|---------------|-------------|-------------|-------------|
| | 293.15 K | 298.15 K | 303.15 K | 308.15 K | 298.15 K | 303.15 K | 308.15 K | 313.15 K |
| 0.000 | 4.41 | 3.26 | 1.72 | 1.18 | -1.27 | -1.52 | -1.05 | -1.00 |
| 0.100 | 6.28 | 4.95 | 3.85 | 3.25 | -0.85 | -0.96 | -0.62 | -0.59 |
| 0.200 | 8.00 | 6.63 | 5.88 | 5.21 | -0.43 | -0.44 | -0.22 | -0.19 |
| 0.300 | 9.58 | 8.30 | 7.83 | 7.09 | -0.02 | 0.05 | 0.16 | 0.18 |
| 0.400 | 11.02 | 9.95 | 9.69 | 8.86 | 0.40 | 0.51 | 0.51 | 0.52 |
| 0.500 | 12.32 | 11.59 | 11.45 | 10.54 | 0.82 | 0.92 | 0.83 | 0.83 |
| 0.600 | 13.48 | 13.22 | 13.13 | 12.13 | 1.24 | 1.30 | 1.13 | 1.13 |
| 0.700 | 14.49 | 14.83 | 14.71 | 13.62 | 1.65 | 1.65 | 1.40 | 1.39 |
| 0.800 | 15.37 | 16.43 | 16.20 | 15.02 | 2.07 | 1.96 | 1.64 | 1.63 |
| 0.900 | 16.10 | 18.01 | 17.60 | 16.32 | 2.49 | 2.23 | 1.86 | 1.85 |
| 1.000 | 16.69 | 19.58 | 18.92 | 17.52 | 2.91 | 2.46 | 2.05 | 2.04 |

^a x_1 is the mole fraction of ethanol (1) in ethanol (1) + water (2) mixtures free of solute.

TABLE 3. D values (kJ mol^{-1}) of L-arabinose (3) and DL-malic acid (3) in ethanol (1) + water (2) mixtures at several temperatures.

Q and $RT\kappa_T$ values of the binary aqueous-ethanol mixtures at all temperatures, as well as the partial molar volumes of ethanol and water were taken from those reported in previous studies with other solutes [10, 13, 14]. Otherwise, in a first approach the molar volume of these compounds were considered here as independent of the cosolvent composition and temperature, and also as equivalent to those presented in solid state. Thus, these values were calculated by considering the density values reported in the literature (1.585 g cm^{-3} for L-arabinose and 1.601 g cm^{-3} for DL-malic acid) [15]. In this way, the molar volume values of 83.75 and $94.72 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$ were obtained, respectively. Furthermore, from these values the molecular radiuses (r_3) of both compounds were calculated by using the equation 9 as 0.335 nm for L-arabinose and 0.321 nm for DL-malic acid.

Table 4 shows that all the $G_{1,3}$ values of both compounds are negative with the maximum values in neat ethanol for L-arabinose and neat water for DL-malic acid. In different way, Table 5 shows that $G_{2,3}$ values of L-arabinose are negative in water-rich mixtures but positive beyond in the mixture with $x_1 \geq 0.30$ reaching maximum value in the mixture with $x_1 = 0.80$. Otherwise, $G_{2,3}$

values of DL-malic acid are negative in almost all mixtures with the exception of $x_1 = 0.80$ at all temperatures and $x_1 = 0.90$ at 298.15 K and 303.15 K. These results could be interpreted as the preference of both solutes by water molecules in ethanol-rich mixtures.

| x_1^a | L-arabinose | | | | DL-Malic acid | | | |
|---------|-------------|-------------|-------------|-------------|---------------|-------------|-------------|-------------|
| | 293.15 K | 298.15 K | 303.15 K | 308.15 K | 298.15 K | 303.15 K | 308.15 K | 313.15 K |
| 0.000 | -60.9 | -69.8 | -81.2 | -85.2 | -91.9 | -93.5 | -90.0 | -89.6 |
| 0.100 | -44.6 | -54.1 | -62.2 | -66.5 | -89.2 | -90.2 | -87.5 | -87.3 |
| 0.200 | -32.0 | -41.2 | -45.9 | -50.1 | -85.7 | -85.8 | -84.0 | -83.8 |
| 0.300 | -23.0 | -32.0 | -34.8 | -39.8 | -82.2 | -81.7 | -80.9 | -80.7 |
| 0.400 | -15.8 | -24.5 | -27.2 | -33.6 | -79.2 | -78.5 | -78.5 | -78.4 |
| 0.500 | -9.0 | -17.1 | -20.5 | -28.4 | -76.4 | -75.9 | -76.6 | -76.7 |
| 0.600 | -4.2 | -10.3 | -14.5 | -23.5 | -73.9 | -73.8 | -75.1 | -75.3 |
| 0.700 | -10.7 | -12.1 | -15.5 | -23.8 | -72.5 | -72.8 | -74.3 | -74.5 |
| 0.800 | -40.1 | -36.9 | -38.1 | -42.7 | -74.3 | -74.7 | -75.8 | -75.8 |
| 0.900 | -74.2 | -72.0 | -72.4 | -74.0 | -78.3 | -78.5 | -78.9 | -78.9 |
| 1.000 | -91.9 | -91.9 | -91.8 | -91.8 | -80.9 | -80.8 | -80.8 | -80.7 |

^a x_1 is the mole fraction of ethanol (1) in ethanol (1) + water (2) mixtures free of solute.

TABLE 4. $G_{1,3}$ values ($\text{cm}^3 \text{mol}^{-1}$) of L-arabinose (3) and DL-malic acid (3) in ethanol (1) + water (2) mixtures at several temperatures.

| x_1^a | L-arabinose | | | | DL-Malic acid | | | |
|---------|-------------|-------------|-------------|-------------|---------------|-------------|-------------|-------------|
| | 293.15 K | 298.15 K | 303.15 K | 308.15 K | 298.15 K | 303.15 K | 308.15 K | 313.15 K |
| 0.000 | -93.6 | -93.6 | -93.6 | -93.5 | -82.6 | -82.6 | -82.6 | -82.6 |
| 0.100 | -77.1 | -80.2 | -82.8 | -84.2 | -84.7 | -85.1 | -84.2 | -84.1 |
| 0.200 | -45.5 | -52.5 | -56.0 | -59.2 | -84.9 | -85.0 | -83.6 | -83.5 |
| 0.300 | 3.9 | -8.0 | -11.8 | -18.7 | -82.3 | -81.5 | -80.4 | -80.2 |
| 0.400 | 79.3 | 60.7 | 54.7 | 40.4 | -75.7 | -74.2 | -74.2 | -74.1 |
| 0.500 | 197.9 | 171.1 | 159.0 | 131.3 | -63.1 | -61.5 | -64.0 | -64.5 |
| 0.600 | 382.9 | 351.9 | 329.0 | 280.2 | -40.0 | -39.7 | -46.9 | -48.2 |
| 0.700 | 612.1 | 601.9 | 571.7 | 501.5 | -4.0 | -7.0 | -20.4 | -22.5 |
| 0.800 | 698.8 | 747.1 | 729.2 | 663.5 | 24.6 | 17.9 | 1.4 | 0.6 |
| 0.900 | 527.0 | 603.2 | 590.0 | 542.7 | 15.1 | 5.3 | -8.7 | -8.7 |
| 1.000 | 307.5 | 371.4 | 350.7 | 313.8 | -12.1 | -23.2 | -33.4 | -34.0 |

^a x_1 is the mole fraction of ethanol (1) in ethanol (1) + water (2) mixtures free of solute.

TABLE 5. $G_{2,3}$ values ($\text{cm}^3 \text{mol}^{-1}$) of L-arabinose (3) and DL-malic acid (3) in ethanol (1) + water (2) mixtures at several temperatures.

As was already mentioned, to use the IKBI method, the correlation volume of both compounds was iterated three times by using the

equations 2, 7 and 8) to obtain the values reported in Table 6. It is noteworthy that these values are almost independent on temperature in water-rich mixtures but they increases slightly in ethanol-rich mixtures. This could be a consequence of the higher thermal expansibility of ethanol compared with water [16].

| x_1^a | L-arabinose | | | | DL-Malic acid | | | |
|---------|-------------|-------------|-------------|-------------|---------------|-------------|-------------|-------------|
| | 293.15 K | 298.15 K | 303.15 K | 308.15 K | 298.15 K | 303.15 K | 308.15 K | 313.15 K |
| 0.000 | 565 | 566 | 566 | 566 | 529 | 529 | 530 | 530 |
| 0.100 | 632 | 632 | 633 | 634 | 590 | 591 | 592 | 593 |
| 0.200 | 694 | 695 | 697 | 699 | 651 | 653 | 655 | 656 |
| 0.300 | 751 | 753 | 755 | 758 | 713 | 715 | 717 | 719 |
| 0.400 | 801 | 805 | 808 | 812 | 773 | 775 | 778 | 780 |
| 0.500 | 847 | 852 | 856 | 862 | 832 | 835 | 837 | 841 |
| 0.600 | 888 | 894 | 899 | 907 | 890 | 893 | 896 | 900 |
| 0.700 | 933 | 937 | 943 | 952 | 946 | 950 | 954 | 959 |
| 0.800 | 1002 | 1003 | 1008 | 1016 | 1006 | 1010 | 1015 | 1019 |
| 0.900 | 1099 | 1100 | 1104 | 1110 | 1070 | 1074 | 1079 | 1084 |
| 1.000 | 1190 | 1194 | 1199 | 1203 | 1134 | 1138 | 1142 | 1147 |

^a x_1 is the mole fraction of ethanol (1) in ethanol (1) + water (2) mixtures free of solute.

TABLE 6. Correlation volume ($cm^3 mol^{-1}$) of L-arabinose (3) and DL-malic acid (3) in ethanol (1) + water (2) mixtures at several temperatures.

The values of $\delta x_{1,3}$ vary non-linearly with the ethanol proportion in these aqueous mixtures at all the temperatures studied (Table 7 and Fig. 3). In water-rich mixtures, the addition of ethanol to water makes positive the $\delta x_{1,3}$ values of L-arabinose from pure water to the mixture with $x_1 = 0.20$ reaching a maximum of 4.2×10^{-3} in the mixtures with $x_1 = 0.10$ at 298.15 K. This maximum diminishes with the temperature arising. On the contrary, the $\delta x_{1,3}$ values of DL-malic acid are slightly negative in water-rich mixtures, except in $x_1 = 0.30$ at 298.15 K, where a really low positive value is observed. Nevertheless, it is not easy to assign these $\delta x_{1,3}$ values to preferential solvation effects because they are lower than 0.01 and could be owing to uncertainties propagation in the IKBI calculations [12, 17].

Otherwise, from these ethanol proportions up to neat ethanol, the $\delta x_{1,3}$ values are significantly negative, and hence, L-arabinose and DL-malic acid are preferentially solvated by water in ethanol-rich

| x_1 ^a | L-arabinose | | | | DL-Malic acid | | | |
|--------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|---------------|-------------|-------------|-------------|
| | 293.15 K | 298.15 K | 303.15 K | 308.15 K | 298.15 K | 303.15 K | 308.15 K | 313.15 K |
| 0.000 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.100 | 0.52 | 0.42 | 0.34 | 0.29 | -0.080 | -0.092 | -0.060 | -0.058 |
| 0.200 | 0.33 | 0.28 | 0.25 | 0.23 | -0.021 | -0.021 | -0.011 | -0.009 |
| 0.300 | -0.76 | -0.68 | -0.66 | -0.61 | 0.002 | -0.005 | -0.016 | -0.018 |
| 0.400 | -2.71 | -2.46 | -2.37 | -2.16 | -0.118 | -0.147 | -0.145 | -0.146 |
| 0.500 | -5.50 | -5.06 | -4.85 | -4.37 | -0.436 | -0.472 | -0.410 | -0.399 |
| 0.600 | -8.95 | -8.45 | -8.06 | -7.25 | -0.980 | -0.983 | -0.814 | -0.779 |
| 0.700 | -11.80 | -11.63 | -11.17 | -10.16 | -1.608 | -1.540 | -1.263 | -1.215 |
| 0.800 | -10.65 | -11.17 | -10.93 | -10.14 | -1.663 | -1.554 | -1.294 | -1.274 |
| 0.900 | -4.99 | -5.55 | -5.43 | -5.05 | -0.839 | -0.751 | -0.628 | -0.625 |
| 1.000 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |

^a x_1 is the mole fraction of ethanol (1) in ethanol (1) + water (2) mixtures free of solute.

TABLE 7. $100 \delta x_{1,3}$ ($\text{cm}^3 \text{mol}^{-1}$) of L-arabinose (3) and DL-malic acid (3) in ethanol (1) + water (2) mixtures according to IKBI method at several temperatures.

mixtures. Both compounds act as Lewis acids in solution owing the hydrogen atoms in their -OH groups (Fig. 1) to establish hydrogen bonds with proton-acceptor functional groups in the solvents (oxygen atoms in -OH groups). Additionally, these compounds could act as Lewis bases due to the free electron pairs in the oxygen atoms of their hydroxyl and carbonyl groups (Fig. 1) to interact with the acidic hydrogen atoms in both solvents.

Based on these preferential solvation results, it is probable that in water-rich mixtures, where the DL-malic acid is apparently preferentially solvated by ethanol molecules, this compound is slightly acting as Lewis acid with ethanol molecules because this cosolvent is more basic than water as described by their Kamlet-Taft hydrogen bond acceptor parameters, i.e. $\beta = 0.75$ and 0.47 for ethanol and water, respectively [18, 19]. On the other hand, in ethanol-rich mixtures, where both L-arabinose and DL-malic acid are preferentially solvated by water, these compounds could be acting mainly as Lewis bases in front of water because water is more acidic than ethanol as also described by their Kamlet-Taft hydrogen bond donor parameters, i.e. $\alpha = 1.17$ and 0.86 for water and ethanol, respectively [18, 20].

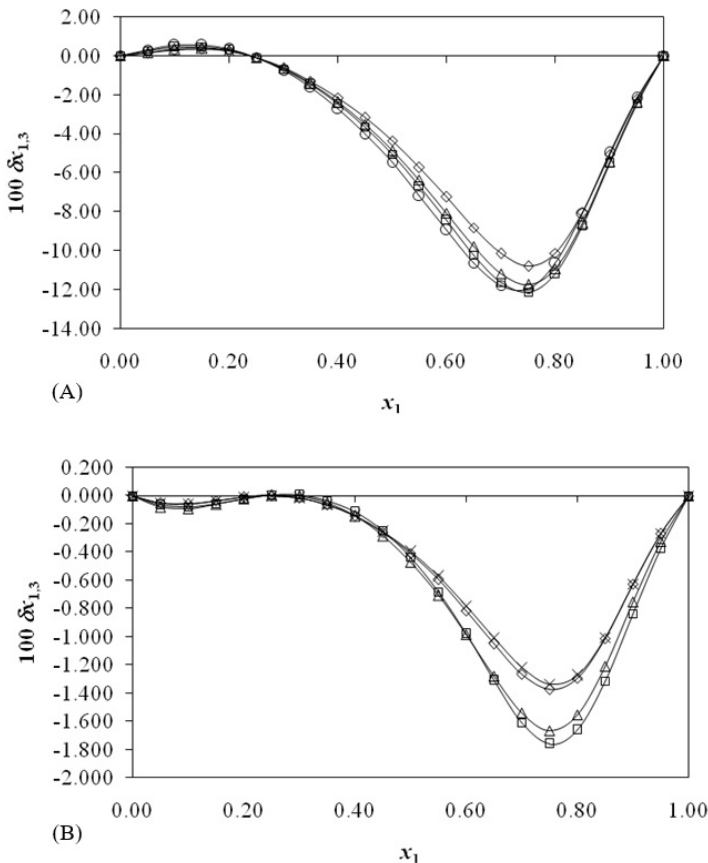


FIGURE 3. $\delta x_{1,3}$ values of *L*-arabinose (A) and *DL*-malic acid (B) in ethanol (1) + water (2) mixtures according to the IKBI method at several temperatures.
 ○: 293.15 K, □: 298.15 K, △: 303.15 K, ◇: 308.15 K, ×: 313.15 K.

Furthermore, Fig. 4 compares the preferential solvation behavior of these compounds including xylitol at 298.15 K [10]. It is noteworthy that the behaviors exhibited by *L*-arabinose and xylitol are very similar, being both of them highly preferentially solvated by water in ethanol-rich mixtures, with maximum $\delta x_{1,3}$ values higher than -0.12 in the mixture with $x_1 = 0.75$; whereas, the preferential solvation of *DL*-malic acid by water is not so high as the other two compounds with a maximum $\delta x_{1,3}$ value of -1.76×10^{-2} in the mixture of $x_1 = 0.75$. These three hydroxyl-compounds present different functional groups

as follows: xylitol is a polyhydroxy-alcohol, L-arabinose is a polyhydroxy-aldehyde, and DL-malic acid is a hydroxy-dicarboxylic acid. For this reason, as a polarity criterion [21], the Hildebrand solubility parameters (δ_3 expressed in $\text{MPa}^{1/2}$) were calculated for these compounds based on the Fedors method [22]. δ_3 values were calculated as $(\Delta U^\circ/V^\circ)^{1/2}$, with ΔU° (expressed in J mol^{-1}) as the molar internal energy and V° (expressed in $\text{cm}^3 \text{mol}^{-1}$) the molar volume [21]. Table 8 shows the respective ΔU° values for these compounds. In this way, δ_3 values are as follows: $36.0 \text{ MPa}^{1/2}$ for xylitol, $36.2 \text{ MPa}^{1/2}$ for L-arabinose, and $31.9 \text{ MPa}^{1/2}$ for DL-malic acid. It is noteworthy that solubility parameters of xylitol and L-arabinose are very similar as also are their preferential solvation behaviors. Thus, the δ_3 value is the lowest being the less polar compound and therefore, the DL-malic acid preferential solvation by water in ethanol-rich mixtures is significantly lower compared with xylitol and L-arabinose.

Finally, it is important to note that all these results about preferential solvation of these compounds are in good agreement with those described previously in the literature, which were based in more basic dissolution thermodynamic approaches [2, 3, 23].

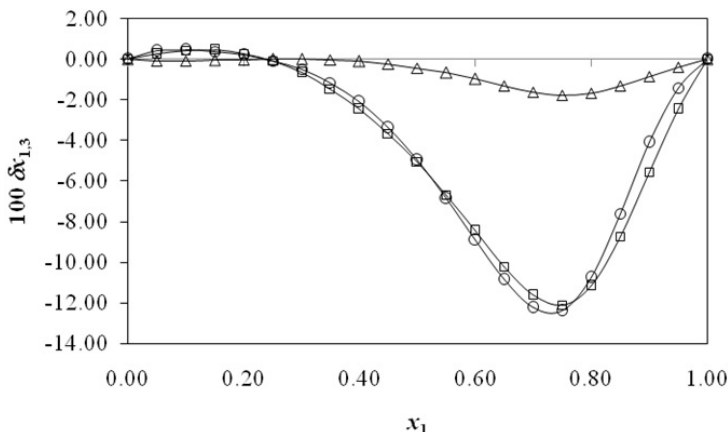


FIGURE 4. $\delta_{1,3}$ values of xylitol (\circ), L-arabinose (\square) and DL-malic acid (\triangle) in ethanol (1) + water (2) mixtures according to the IKBI method at 298.15 K.

| Group | Xylitol | | L-arabinose | | DL-Malic acid | |
|-------------------------|--|---------------------------------------|--|---------------------------------------|---|---------------------------------------|
| | Group number | $\Delta U^\circ / \text{kJ mol}^{-1}$ | Group number | $\Delta U^\circ / \text{kJ mol}^{-1}$ | Group number | $\Delta U^\circ / \text{kJ mol}^{-1}$ |
| -CH ₂ - | 2 | 2 x 4.94 = 9.88 | 1 | 4.94 | 1 | 4.94 |
| >CH- | 3 | 3 x 3.43 = 10.29 | 3 | 3 x 3.43 = 10.29 | 1 | 3.43 |
| -OH on adjacent C atoms | 5 | 5 x 21.9 = 109.5 | 4 | 4 x 21.9 = 87.6 | 1 | 21.9 |
| -CHO | - | - | 1 | 21.4 | - | - |
| -COOH | - | - | - | - | 2 | 2 x 27.6 = 55.2 |
| | $\Sigma (\Delta U^\circ) = 129.67 \text{ kJ mol}^{-1}$ | | $\Sigma (\Delta U^\circ) = 124.23 \text{ kJ mol}^{-1}$ | | $\Sigma (\Delta U^\circ) = 85.47 \text{ kJ mol}^{-1}$ | |

TABLE 8. Fedor's method applied to estimate the molar internal energy of xylitol (3), L-arabinose (3) and DL-malic acid (3).

Conclusions

Quantitative values for the local mole fractions of ethanol and water around these compounds were derived based on the IKBI method applied to some literature equilibrium solubility values in ethanol + water mixtures at several temperatures. Thus, these compounds are preferentially solvated by water in mixtures beyond 0.20 or 0.25 in mole fraction of ethanol at all temperatures considered. It is noteworthy that these negative $\delta x_{1,3}$ values diminish as temperature arises for both compounds. It can also be concluded for these compounds that the less polar a compound is its $\delta x_{1,3}$ magnitude also is.

References

- [1] S. Budavari *et al.*, *The Merck Index: An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals*, 13th ed. (Merck & Co, 2001).
- [2] L. Jiang *et al.*, *J. Mol. Liq.* **211**, 406 (2015).
- [3] Y. Yuan *et al.*, *Fluid Phase Equilib.* **377**, 27 (2014).
- [4] J. Swarbrick and J. Boylan, *Encyclopedia of Pharmaceutical Technology*, Vol. 3 (Marcel Dekker, Inc. New York, 1988) pp. pp. 375–398.

- [5] A. Jouyban, *Handbook of Solubility Data for Pharmaceuticals* (CRC Press, 2010).
- [6] Y. Marcus, *J. Mol. Liq.* **140**, 61 (2008).
- [7] Y. Marcus, *Acta Chim. Slov* **56**, 40 (2009).
- [8] Y. Marcus, *Solvent Mixtures: Properties and Selective Solvation* (CRC Press, 2002).
- [9] Y. Marcus, *Preferential solvation in mixed solvents. In: Fluctuation Theory of Solutions: Applications in Chemistry, Chemical Engineering, and Biophysics*, edited by P. Smith, E. Matteoli, and J. O'Connell (CRC Press, Taylor & Francis Group, 2013).
- [10] D. Delgado, E. Vargas, and F. Martínez, *Rev. Colomb. Quím.* **42**, 59 (2013).
- [11] K. E. Newman, *Chem. Soc. Rev.* **23**, 31 (1994).
- [12] A. Ben-Naim, *Pure Appl. Chem.* **62**, 25 (1990).
- [13] D. R. Delgado, M. Á. Peña, and F. Martínez, *Rev. Colomb. Cienc. Quím. Farm.* **42**, 298 (2013).
- [14] D. R. Delgado and F. Martínez, *J. Mol. Liq.* **193**, 152 (2014).
- [15] D. R. Lide, *Handbook of Chemistry and Physics*, 84th ed. (CRC Press, 2003).
- [16] J. Jiménez, J. Manrique, and F. Martínez, *Rev. Colomb. Cienc. Quím. Farm.* **33**, 145 (2004).
- [17] Y. Marcus, *Pure Appl. Chem.* **62**, 2069 (1990).
- [18] Y. Marcus, *The Properties of Solvents* (John Wiley & Sons, 1998).
- [19] M. J. Kamlet and R. W. Taft, *J. Am. Chem. Soc.* **98**, 377 (1976).
- [20] R. W. Taft and M. J. Kamlet, *J. Am. Chem. Soc.* **98**, 2886 (1976).
- [21] A. F. M. Barton, *Handbook of Solubility Parameters and Other Cohesion Parameters*, 2nd ed. (CRC Press, 1991).
- [22] R. F. Fedors, *Polymer Eng. Sci.* **14**, 147 (1974).
- [23] Z. Wang, Q. Wang, X. Liu, W. Fang, Y. Li, and H. Xiao, *Korean J. Chem. Eng.* **30**, 931 (2013).

DYNAMICS AND ENTANGLEMENT OF A QUANTUM DOT-CAVITY SYSTEM COUPLED BY A NON-LINEAR OPTICAL INTERACTION

DINÁMICA Y ENTRELAZAMIENTO DE UN SISTEMA CAVIDAD-PUNTO CUÁNTICO ACOPLADO POR MEDIO DE UNA INTERACCIÓN ÓPTICA NO LINEAL

Edgar A. Gómez¹, Santiago E. Arteaga¹, Herbert
Vinck-Posada²

¹ Programa de Física, Universidad del Quindío, Armenia, Colombia.

² Grupo de Óptica e Información Cuántica, Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

(Recibido: Agosto/2016. Aceptado: Octubre/2016)

Abstract

We propose a simple theoretical model for a dissipative quantum dot-microcavity system interacting with a non-linear optical interaction. The Lindblad master equation formalism is considered to study the full dynamics for both weak and strong coupling regimes. The photoluminescence spectra of the system at the stationary limit is calculated in an exact form, and the effect due to non-linear optical interaction is explicitly evidenced. The entanglement of the system is calculated, and we found revivals and sudden death are evidenced. We also study the relationship between the light-matter and non-linear optical interaction terms by calculating the average photon number.

Keywords: Entanglement, quantum dot, microcavity, non-linear optical interaction.

Resumen

Se propone un modelo teórico sencillo para un sistema disipativo de punto cuántico-microcavidad que interactúan a través de una interacción óptica no lineal. El

formalismo de la ecuación maestra en la forma de Lindblad es considerado para estudiar la dinámica del sistema en los regímenes de acoplamiento débil y fuerte, respectivamente. El espectro de fotoluminiscencia del sistema en el límite estacionario es calculado en forma exacta, y se muestra el efecto de la interacción óptica no lineal explícitamente sobre éste. Se calcula el entrelazamiento del sistema, y se encuentra resurgimientos y muerte súbita del entrelazamiento. Adicionalmente, se estudia la relación entre los términos de interacción luz-materia (Jaynes-Cummings) e interacción óptica no lineal (medio Kerr) por medio del número medio de fotones.

Palabras clave: Entrelazamiento, punto cuántico, microcavidad, interacción óptica no lineal.

Introduction

Recently, nonlinear photonic crystals (PCs) and microcavities have attracted much attention due to their important applications, particularly due to the possibility to control the light propagation and the enhancement of various nonlinear optical phenomena. For example, the Second-Harmonic (SHG) and Third-Harmonic (THG) generation [1, 2] have wide applications as electro-optic modulators and optical switches [3]. Unusual effects like off-resonant dot-cavity interaction, photon blockade, generation of entangled photons and the Purcell enhancement have a number of applications in nano-photonics devices and quantum information processing [4]. The embedding the quantum dots in photonic band-gap structures offers a way of controlling spontaneous emission of single photons due to nonlinearities of light-matter coupling strength, and enabling cavity-quantum electrodynamics experiments [5]. For example, the bistability phenomenon can be observed as the result of the Kerr effect (due to the presence of other QDs in the cavity). It describes a self-interaction of a mode of radiation field in a cavity filled by χ^3 -nonlinear medium. Moreover it is known to be responsible, in particular, for dispersive optical bistability and for amplitude squeezing [6], and has also been used to describe formation of Schrödinger-cat states [7]. In the present paper, we propose a simple theoretical model for describing a quantum dot-cavity

(QD-Cavity) system coupled by a non-linear optical interaction (Kerr medium), and we investigate the effects on the dynamics of the system in both weak and strong coupling regimes, as well as on photoluminescence spectrum and the entanglement of the system. This paper is organized as follows: section 1 explains the theoretical background of our model, as well as the Lindblad master equation formalism for studying the QD-Cavity system. In addition, we discuss the theoretical tools for computing the photoluminescence spectrum and the quantification of entanglement. In section 2 the results are discussed. Finally, we conclude in section 2.4.

1 Theoretical Background

We are interested in study a quantum dot embedded in a micropillar cavity (QD-Cavity system) coupled by a confined mode of the electromagnetic field, that interacts with a non-linear optical interaction. This nonlinearity can be involved by considering an effective Kerr medium that incorporate two-photon absorption, it is a process where two photons are absorbed simultaneously, exciting e.g. a quantum dot to a higher-lying state, with the energy increase being equal to the sum of the photon energies. The QD-Cavity system is depicted in Fig. 1, and the non-linear system can be modelled, in the rotating wave approximation, by the following Hamiltonian

$$\hat{H} = \hbar\omega\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hbar\omega_a\hat{\sigma}^\dagger\hat{\sigma} + \hbar g(\hat{a}^\dagger\hat{\sigma} + \hat{a}\hat{\sigma}^\dagger) + \hbar\kappa(\hat{a}^\dagger\hat{a})^2, \quad (1)$$

where $\hat{\sigma}^\dagger = |X\rangle\langle G|$ and $\hat{\sigma} = |G\rangle\langle X|$ are the exciton operators, and \hat{a}^\dagger (\hat{a}) is the creation (annihilation) operators for photons. ω_a and ω are the exciton and photon energy, respectively (we have set $\hbar = 1$). The light-matter interaction is modeled by the well-known Jaynes-Cummings interaction g (JC), and the non linear optical interaction by the κ parameter. We also define the detuning between field and cavity frequency as $\Delta = \omega - \omega_a$.

The Hamiltonian given by the Eq. (1) can be diagonalized when it is written in the bared basis $\{|G\rangle, |X\rangle\} \otimes \{|n\rangle\}_{n=0}^\infty$. Thus, it takes the block-diagonal form:

$$H = \begin{pmatrix} \omega n + \kappa n^2 & g\sqrt{n} \\ g\sqrt{n} & \omega_a n + \omega(n-1) + \kappa(n-1)^2 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

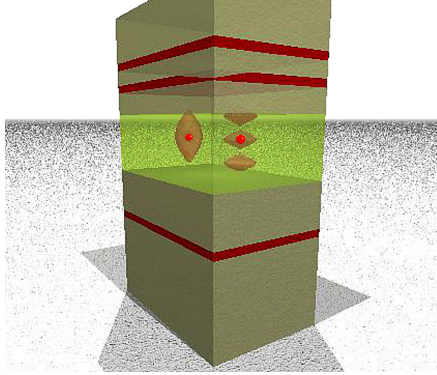


FIGURE 1. *Illustration of two quantum dots (red balls) embedded in a micropillar cavity coupled by two different confined modes of the electromagnetic field. The non-linear optical interaction is depicted in light-green color (Kerr medium).*

for n -th excitation manifold basis. The eigenvalues can be easily obtained and are given by

$$\omega_{\pm} = \frac{1}{2}(\delta \pm \sqrt{4g^2 + (\Delta + \kappa)^2}), \quad (3)$$

where we have defined $\delta = \kappa + \omega_a + \omega$. Note that the eigenvalues of the system depend on both interaction terms, the Fig. 2 shows the dispersion relation vs energy. The effect due to the κ is evidenced as a frequency shift and the coupling g behaves accordingly to the well-known Jaynes-Cummings model.

1.1 Lindblad master equation.

To include the effects of the environment is required treat the QD-Cavity system as an open quantum system. It is, to define the Hamiltonians associated to the reservoirs, which is made of electron-hole pairs, photons, phonons and terms associated to a bilinear coupling between the system and reservoirs. The explicit system-reservoir interaction for this model can be found in [8]. After tracing over the external reservoirs degrees of freedom and assuming the validity of the Born-Markov approximation, we obtain the Lindblad master equation for the reduced density matrix, it reads

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{\rho}, \hat{H}] + \frac{\gamma}{2}\mathcal{L}(\hat{a}) + \frac{P}{2}\mathcal{L}(\hat{\sigma}), \quad (4)$$

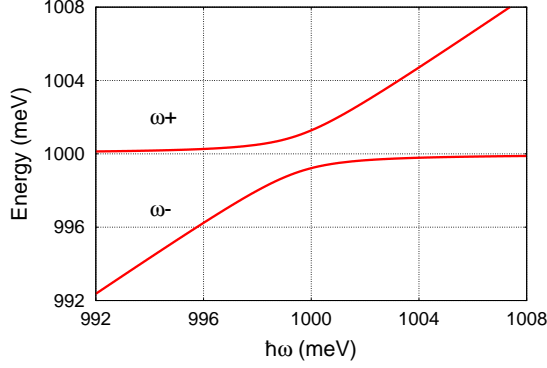


FIGURE 2. *Dispersion relation vs. energy. The eigenvalues ω_{\pm} are separated by distance g in resonance and shifted by an amount κ . The parameters of the system are fixed to $\omega_a = 1000\text{meV}$, $\Delta = 0$, $g = 1\text{meV}$ and $\kappa = 2\text{meV}$.*

where the corresponding Lindblad terms for the incoherent processes of dissipation (γ) and pumping (P) follows the rule: $\mathcal{L}(\hat{O}) = 2\hat{O}\hat{\rho}\hat{O}^\dagger - \hat{O}^\dagger\hat{O}\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{O}^\dagger\hat{O}$. Where γ is the decay rate due to the loss of photons through the cavity mirrors, and P is the rate at which the excitons are being pumped. The dynamical equations for the populations and coherences in the bared basis are given by

$$\begin{aligned}
 \dot{\rho}_{11} &= \gamma\rho_{22} - P\rho_{11}, \\
 \dot{\rho}_{22} &= ig(\rho_{23} - \rho_{32}) - \gamma\rho_{22}, \\
 \dot{\rho}_{33} &= ig(\rho_{32} - \rho_{23}) + P\rho_{11}, \\
 \dot{\rho}_{23} &= i((\omega_a - \omega - \kappa)\rho_{23} + g(\rho_{22} - \rho_{33})) - \frac{\gamma + P}{2}\rho_{23}, \\
 \dot{\rho}_{32} &= c.c(\dot{\rho}_{23}), \\
 \dot{\rho}_{21} &= -i(\omega\rho_{21} + g\rho_{31} + \kappa\rho_{21}) - \frac{\gamma}{2}\rho_{21} - P\rho_{21}, \\
 \dot{\rho}_{12} &= c.c(\dot{\rho}_{21}), \\
 \dot{\rho}_{31} &= -i(\omega_a\rho_{31} + g\rho_{21}) - \frac{P}{2}\rho_{31}, \\
 \dot{\rho}_{13} &= c.c(\dot{\rho}_{31}).
 \end{aligned} \tag{5}$$

where $c.c$ is used to denote the complex conjugate. Note that we have introduced a short notation for lowest quantum states of the system $|1\rangle \equiv |G, 0\rangle$, $|2\rangle \equiv |G, 1\rangle$, $|3\rangle \equiv |X, 0\rangle$. An schematic representation of the action of the process involved in the dynamics

of the system is shown in Fig. 3. It is worth of mentioning that we will consider the lowest excitation manifold for exploring the effects due to non linear optical interaction on both dynamics and photoluminescence spectra.

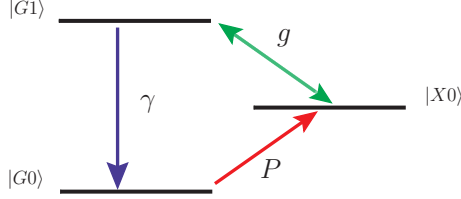


FIGURE 3. Ladder of bared states for a two level quantum dot coupled to the microcavity. The double headed green arrow depicts the light-matter coupling g , red line the exciton pumping rate P , and blue line the spontaneous emission rate γ .

1.2 Quantum Regression Theorem and the Emission Spectrum.

When light excites resonantly a QD-Cavity system one of the most important measurement is the photoluminescence spectrum or so-called emission spectrum of the system. For such task, there are different theoretical approaches in the literature, but frequently this quantity is computed by performing a Fourier transform of the first order correlation function $\langle a^\dagger(t + \tau)a(t) \rangle$, which requires the knowledge of the expectation value of two operators at different times. To obtain the dynamical equation of such correlation function should be applied the Quantum Regression Theorem [6] which states that for an operator \hat{O} the expectation value of the two-time correlation function $\langle \hat{O}^\dagger(t + \tau)\hat{O}(t) \rangle$ satisfies the same equation of motion that as the single-time $\langle \hat{O}(t) \rangle$ does. Following Porrás *et. al.* in Ref. [8] we obtain that:

$$\langle \hat{a}^\dagger(t + \tau)\hat{a}(t) \rangle = \sum_{n=0} \sqrt{n+1} (\langle \hat{a}_{Gn}^\dagger(t + \tau)\hat{a}(t) \rangle + \langle \hat{a}_{Xn}^\dagger(t + \tau)\hat{a}(t) \rangle), \quad (6)$$

where the following definitions has been used: $\hat{a}_{Gn}^\dagger = |Gn + 1\rangle \langle Gn|$, $\hat{a}_{Xn}^\dagger = |Xn + 1\rangle \langle Xn|$, $\hat{\sigma}_n^\dagger = |Xn\rangle \langle Gn|$, $\hat{\zeta}_n = |Gn + 1\rangle \langle Xn - 1|$. It should be noted that these operators act between two consecutive excitation manifolds, and together with our truncation level (first

excitation manifold) in the Fock space, it reduces the number of differential equations that are needed for calculating the emission spectrum. Thus, the relevant subset of equations of motion is given by

$$\begin{aligned}\frac{d\langle\hat{a}_1^\dagger(\tau)\rangle}{d\tau} &= i((\omega + \kappa)\langle\hat{a}_1^\dagger(\tau)\rangle + g\langle\hat{\sigma}_3^\dagger(\tau)\rangle) - \left(\frac{\gamma + P}{2}\right)\langle\hat{a}_1^\dagger(\tau)\rangle, \\ \frac{d\langle\hat{\sigma}_3^\dagger(\tau)\rangle}{d\tau} &= i(\omega_a\langle\hat{\sigma}_3^\dagger(\tau)\rangle + g\langle\hat{a}_1^\dagger(\tau)\rangle) - \frac{P}{2}\langle\hat{\sigma}_3^\dagger(\tau)\rangle.\end{aligned}\quad (7)$$

Particularly, these coupled differential equations can be solved in an exact form, more precisely, we have worked out the solutions and the emission spectrum at the steady-state is given by

$$S(\Omega - \omega) = \frac{\tilde{\rho}_{11} \left(4g^2\tilde{\gamma} + 4g(\gamma\tilde{\Omega} + P(3\tilde{\Omega} - \Delta - \kappa)) + P(\tilde{\gamma}^2 + 4(\tilde{\Omega} - \Delta - \kappa)^2) \right)}{2 \left(2g^2 + P\tilde{\gamma} - 2\tilde{\Omega}(\tilde{\Omega} - \Delta - \kappa) \right)^2 + 2(\gamma\tilde{\Omega} + P(3\tilde{\Omega} - \Delta - \kappa))^2}\quad (8)$$

where we have defined $\tilde{\Omega} = \Omega - \omega_a$, $\tilde{\gamma} = \gamma - 2P$ and the density matrix element at the steady-state as $\tilde{\rho}_{11} = (4g^2(\gamma + P)) / (4g^2(\gamma + 3P) + P(4g^2 + (\gamma + P)^2) + 4(\kappa - \Delta)^2 - 8gP(\kappa + \Delta))$. It should be noted that $\tilde{\rho}_{11}$ has been calculated in the stationary limit, and it plays the role of the initial condition for the dynamics associated to the emission spectrum.

1.3 Measurement of entanglement in QD-Cavity systems

One of the most fundamental entanglement measurements for bipartite systems is known as Peres criterion, it states that if the state of bipartite system is separable then the eigenvalues of its partial transpose are all positive. Since our density matrix ρ has non-zero elements respect to the excitonic subsystem, the density matrix takes the blocks diagonal form 1×1 and 2×2 when written in the bared basis. We follows Quesada and coworkers in Ref. [9] where they have derived a separability criterion which is equivalent to Peres criterion, and it can detect entanglement in QD-Cavity system. It is,

$$E(\rho) = 4 \sum_n \left(\max \{ 0, |\rho_{Xn, Gn+1}| - \sqrt{\rho_{Gn, Gn} \rho_{Xn+1, Xn+1}} \} \right)^2. \quad (9)$$

The evaluation of $E(\rho)$ is in general quite difficult and has to be done numerically.

2 Results and discussion

2.1 Dynamics

We compare the time evolution of the populations ρ_{11} , ρ_{22} , ρ_{33} for two different dynamical regimes of the QD-Cavity system. Fig. 4 shows a coherent exchange of energy of quantum dot with the cavity mode, when evidences that the coupling constant $g \gg \gamma$ is the dominant interaction. Thereby, the strong coupling regime exhibits an oscillatory behaviour with some damping as is shown in panel (a), in contrast to the weak coupling regime where the interaction of quantum dot with the cavity mode is basically incoherent and dominated by the damping rates, e.g $g \ll \gamma$. Therefore, the weak coupling regime shows an enhanced decay rate as is shown in panel (b).

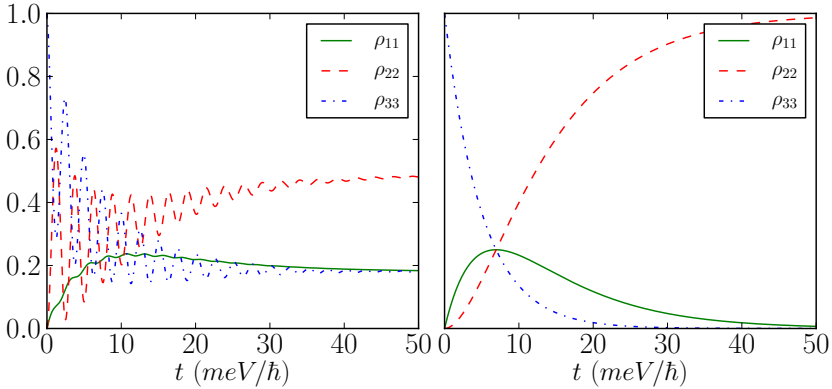


FIGURE 4. Time evolution of the populations ρ_{11} , ρ_{22} , ρ_{33} . Panel (a) shows the strong coupling regime. The parameters are fixed to $g = 1$, $\omega_a = 1000$, $\omega = 998$, $P = 0.1$, $\gamma = 0.1$ and $\kappa = 0.5$. Panel (b) shows the same calculations in weak coupling regime, but $g = 0.01$, $\gamma = 0.1$.

2.2 Emission spectrum

We here focus on the emission spectrum of the system and the effects due to the non-linear optical interaction. In Fig. 5 is shown in panel (a) the spectra for $\kappa = 0$ where is evidenced the typical strong coupling regime in QD-Cavity system. We observe that a frequency shift occurs for the detuning as is shown in panel (b) with $\kappa = 1$. It should be noted that the dynamical regime remains without significant changes.

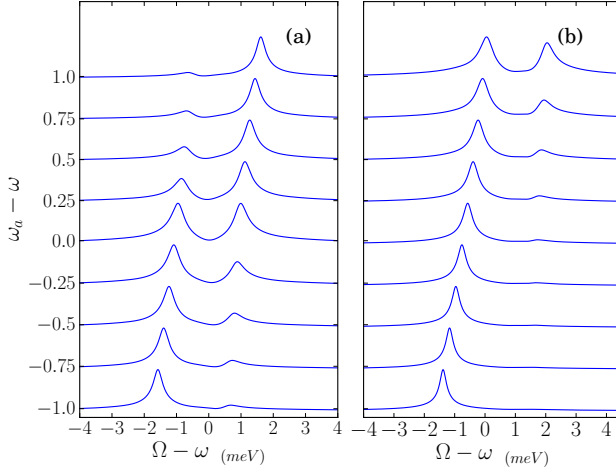


FIGURE 5. Emission spectrum in strong coupling regime is shown in panel (a) with the parameters fixed to $g = 1\text{meV}$, $\omega = 1000\text{meV}$, $P = 0.01\text{meV}$, $\gamma = 0.5\text{meV}$, $\kappa = 0$ and $-1 \leq \Delta \leq 1$. Panel (b) the same calculation but $\kappa = 1$.

2.3 Entanglement

To quantify the entanglement between quantum dot and cavity we considered the criterion given by Eq. (9) which requires the numerical solution of the density matrix of QD-Cavity system. In Fig. 6 is shown the entanglement as a function of non-linear optical interaction κ and time t in the strong coupling regime (a). We found that the entanglement depends strongly on κ and shows the typical Rabi oscillations when it is plotted as a function of κ and time. Departing from $\kappa = 1\text{meV}$ the entanglement increases the frequency of its oscillations, and enhanced its efficiency. It is worth to mention that depending on values of the detuning Δ and κ the pattern of the entanglement will shift along κ axes. In panel (b) the entanglement versus time is shown for two particular values of κ . We found that the phenomena called sudden death of entanglement is evidenced.

2.4 Average number of photons

Since we have pumping and losses processes inside of QD-Cavity system, the average number of photons changes as a result of the competition between those two process, but also the coupling

constants affect the dynamics of the system and they promote the creation or annihilation of number of photons. In Fig. 7, we present the evolution of the average number of photons by calculating $\langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle$ in the stationary limit as a function of coupling constants g and κ . We found that the non-linear optical interaction κ reduces significantly the intensity of the light in the cavity. This is due to that is a two-photon interaction and allows transitions that can rapidly populate states with high number of photons, that promptly will leave the cavity.

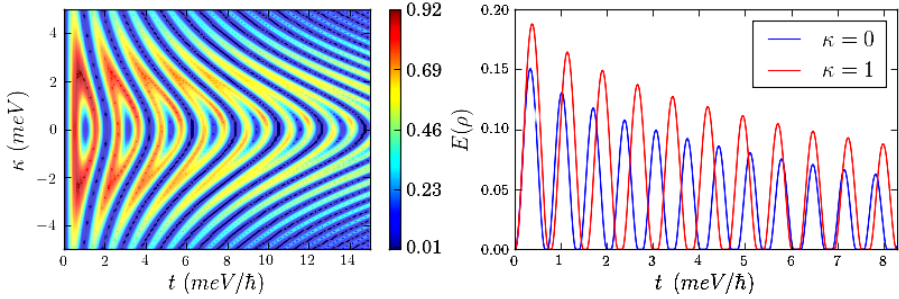


FIGURE 6. Entanglement as a function of non-linear optical interaction κ and time t is shown in panel (a). Departing from $\kappa = 1\text{meV}$ the entanglement increases the frequency of its oscillations, but spoils its efficiency. The parameters are fixed to $g = 1\text{meV}$, $\omega_a = 1000\text{meV}$, $\omega = 991\text{meV}$, $P = 0.001\text{meV}$ and $\gamma = 0.001\text{meV}$. Panel (b) shows the sudden death of entanglement as function of time.

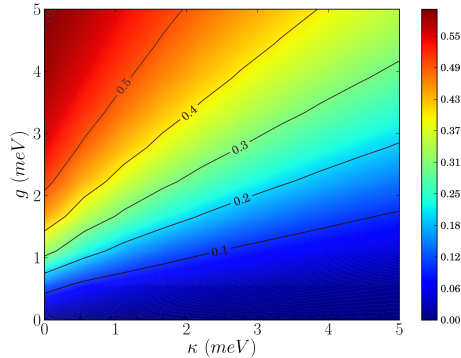


FIGURE 7. Average number of photons as a function of coupling constants g and κ . The parameters of the system are fixed to $\omega_a = 1000\text{meV}$, $\omega = 998\text{meV}$, $P = 0.1\text{meV}$ and $\gamma = 0.1\text{meV}$. For this calculations the Fock space was truncated in $n_{max} = 20$

Conclusions

We found that the non-linear optical interaction (Kerr medium) affects strongly the dynamics of the QD-Cavity system in both weak and strong coupling regimes. The emission spectrum was calculated in an exact form for lowest excitation manifold, and we found that arises a frequency shift in the emission spectrum due to the Kerr medium. In addition, it was examined the influence of Kerr medium on the entanglement of the system as well as on the average photon number.

Acknowledgements

The financial support from Universidad del Quindío for EAG and SEA is gratefully acknowledged. This work has been supported by Colciencias within the project with code 110156933525, contract number 026 – 2013, and HERMES code 17432. Furthermore, HVP acknowledges the technical and computational support of the Grupo de Óptica e Información Cuántica.

References

- [1] A. Majumdar, A. Faraon, D. Englund, I. Fushman, and J. Vučković, SPIE P. **7211**, 72110D (2009).
- [2] M. Kauranen and A. V. Zayats, Nat. Photonics **6**, 737 (2012).
- [3] K. Sakoda, *Optical Properties of Photonic Crystals*, Springer series in optical sciences (Springer, 2001).
- [4] S. Buckley, K. Rivoire, and J. Vučković, Rep. Prog. Phys. **75**, 126503 (2012).
- [5] H. Walther, B. T. H. Varcoe, B.-G. Englert, and T. Becker, Rep. Prog. Phys. **69**, 1325 (2006).
- [6] D. Walls and G. Milburn, *Quantum Optics*, Springer Study Edition (Springer Berlin Heidelberg, 2012).
- [7] Z. Dan, Z. Xiao-Ping, and Z. Qiang, Chinese Phys. B **22**, 064206 (2013).
- [8] J. I. Perea, D. Porras, and C. Tejedor, Phys. Rev. B **70**, 115304 (2004).
- [9] N. Quesada, H. Vinck-Posada, and B. A. Rodríguez, J. Phys. Condens. Mat. **23**, 025301 (2011).

ANÁLOGOS CUÁNTICOS Y ELECTRODINÁMICOS APLICADOS AL SISTEMA ÓPTICO DIELÉCTRICO-SUSTRATO PARA CURSOS DE FÍSICA

LIGHT-ELECTRON WAVE ANALOGY APPLIED TO THE OPTICAL SYSTEM DIELECTRIC-SUBSTRATE FOR PHYSICS COURSES

Jhon H. Vargas¹, Raúl E. Castiblanco², Jhon Morales²

¹ Departamento de Física, Universidad Militar Nueva Granada, Bogotá, Colombia.

² Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

(Recibido: Julio/2016. Aceptado: Septiembre/2016)

Resumen

Se establece la analogía entre la propagación de electrones en pozos cuánticos, con la propagación de ondas electromagnéticas entre medios dieléctricos. Al ser estudiados los fenómenos de transmisión en medios estratificados; pozos o dieléctricos, se encuentran resultados análogos. En primer lugar, se describe la transmitancia para el caso cuántico como electrodinámico. Luego, las relaciones de dispersión mediante los coeficientes de transmisión en ambos casos (electrones-luz) relacionando estos dos sistemas. Y finalmente se compara esta equivalencia con los resultados experimentales en la zona transparente (baja absorción 800-2500 (nm)) del espectro de transmisión de la película delgada de *ZnSe*, utilizando el método de la matriz de transferencia (MMT).

Palabras clave: Ondas, película delgada, pozo y barrera de potencial, dieléctrico, coeficiente de transmisión, educación.

Abstract

The analogy between the solutions of Schrödinger equation with Helmholtz equation in a dimension is established, mainly of particle propagation (electrons) on quantum wells, with the propagation of electromagnetic waves (light) among electrical means. When transmission phenomena are studied in layered media, wells or dielectrics, they are found in analogical results. In this work, it is first presented the transmittance for quantum case and electrodynamic case independently. Then, the scattering amplitudes are related in both cases (electrons and waves), describing the connection and representation between these two systems. Finally they are compared with the experimental results in the transparent zone (low-absorption 800-2500 (nm)) of ZnSe thin film transmission spectrum, making use of the Transfer Matrix Method (TMM).

Keywords: Waves, thin film, well and barrier potential, dielectric, transmission coefficient, education.

1. Introducción

Con el objetivo de describir los análogos entre los fenómenos cuánticos y electrodinámicos en la propagación de ondas y partículas, se analizan las soluciones de las ecuaciones de Schrödinger y Helmholtz en una dimensión. Estas dos teorías aparentemente independientes (clásicas y cuánticas), tradicionalmente se enseñan como sistemas separados o diferentes, sin embargo, se pueden establecer relaciones importantes entre las mismas, las cuales pueden ser aplicadas en la enseñanza de la Física como también en la caracterización óptica de materiales dieléctricos[1, 2].

Al estudiar estos fenómenos a través del método de la matriz de transferencia (MMT) [3–5], es posible visualizar las analogías o relaciones existentes entre el fenómeno de propagación de electrones sobre un potencial cuadrado, atractivo o repulsivo, con los fenómenos de propagación de una onda electromagnética polarizada entre medios dieléctricos bajo incidencia normal.

El presente trabajo, se inicia con la descripción del fenómeno de transmisión de un electrón sobre un pozo o barrera de potencial, describiendo así, los casos ya bien conocidos por la teoría cuántica; como interferencia y efecto túnel[6]. Luego se describe el fenómeno de transmisión de una onda electromagnética plana sobre una placa dieléctrica, en ambos casos a partir del (MMT), y finalmente se establecen analogías entre los casos mencionados anteriormente[5]. Una vez descritos los fenómenos de transmisión para los casos óptico y cuántico, se obtiene el espectro de transmisión para un sistema óptico aire-vidrio-aire a partir de su análogo cuántico, obteniendo los mismos resultados que los reportados por el grupo GALIFA[2]. Posteriormente, se compara con la transmisión obtenida experimentalmente del mismo sistema en la zona de baja absorción de la película delgada semiconductor $ZnSe$, es decir, con longitudes de onda (λ) incidentes desde 800 (nm) hasta 2500 (nm), confirmando indirectamente la validez experimental de la equivalencia o analogía entre la ecuación de Schrödinger y Helmholtz.

2. Transmisión para el Pozo y la Barrera de Potencial

A partir del (MMT) se pueden calcular los coeficientes de transmisión para una partícula incidente sobre una barrera o pozo de potencial, éste método consiste en escribir la continuidad de la función de onda y su derivada en cada interfase, obteniendo un sistema de dos ecuaciones por cada una de las fronteras o discontinuidades del potencial, y de este modo, se trabajan las amplitudes incidentes y transmitidas en términos de una matriz llamada *Matriz de Transferencia*, en donde, el inverso de la norma al cuadrado del elemento a_{11} corresponde al coeficiente de transmisión. A partir de este cálculo, se encontró que los coeficientes de transmisión para una barrera y un pozo de potencial son [6]:

$$T = \begin{cases} \frac{4\eta(\eta-1)}{4\eta(\eta-1)+\sin^2(\chi\sqrt{\eta-1})} & \eta > 1, \text{ Barrera.} \\ \frac{4\eta(\eta+1)}{4\eta(\eta+1)+\sin^2(\chi\sqrt{\eta+1})} & \eta > 0, \text{ Pozo.} \end{cases} \quad (1)$$

donde $\eta = \frac{E}{V_0}$ es una relación de energía, y $\chi = \frac{2a}{\hbar} \sqrt{2mV_0}$ es la opacidad de la barrera o pozo. La figura 1, muestra el coeficiente

de transmisión en términos de la energía incidente con respecto al potencial η , con $\chi = 15$, tanto para el pozo como para la barrera.

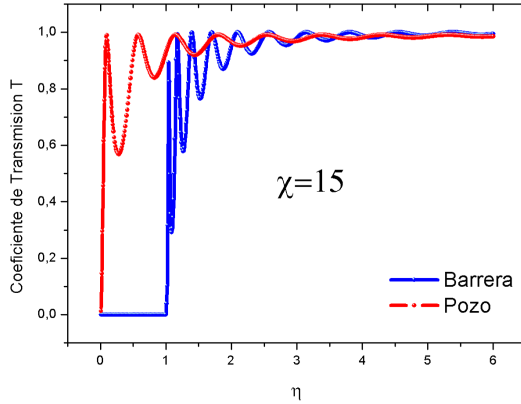


FIGURA 1. Transmitancia en función de la energía incidente sobre el potencial

En esta se puede observar que la transmisión tiene máximos y mínimos debidos a la diferencia de caminos entre las múltiples reflexiones que existen en el interior de barrera o pozo, es decir, interferencia tipo Fabrit-Pérot, en donde, los máximos se pueden calcular en el caso de la barrera con $\eta_n = \left(\frac{n\pi}{\chi}\right)^2 + 1$, siendo n el valor entero para el cual la barrera es completamente transparente. En el caso del pozo de potencial con $\eta_n = \left(\frac{n\pi}{\chi}\right)^2 - 1$, la interferencia de la barrera sucede cuando la energía E del electrón es mayor al potencial V_0 , de lo contrario no hay interferencia, si no, efecto túnel; en el caso del pozo siempre ocurrirá interferencia, ya que $E > 0 > V_0$ [6–8].

3. Transmisión de una onda electromagnética a través de una placa dieléctrica

Cuando sobre una placa dieléctrica de espesor d , incide normalmente una onda electromagnética plana polarizada (TE). los índices de refracción de los tres medios no permeables son n_1, n_2, n_1 . Ahora bien, para calcular el coeficiente de transmisión, y debido a que la onda esta polarizada de tal manera que la incidencia de los campos es normal, solamente las componentes normales a la interfase establecen la continuidad de los campos. A partir de estas, se

encuentra que el coeficiente de transmisión en términos de la longitud de onda (λ), esta dada por:

$$T = \frac{1}{1 + \left(\frac{n_2^2 - n_1^2}{2n_1 n_2}\right)^2 \sin^2\left(\frac{\omega n_2}{c} d\right)} \quad (2)$$

esta ecuación muestra el resultado esperado, ya que el término $\sin^2\left(\frac{\omega n_2}{c} d\right)$ describe un patrón de interferencia que depende del espesor de la placa y de la longitud de onda incidente, de la siguiente manera:

- Cuando $\lambda \sim 2\pi n_2 d$, (película delgada) existe interferencia Fabrit-Pérot. Que en su forma esta descrita por (2).
- Cuando $\lambda \ll 2\pi n_2 d$, (película gruesa-sustrato) deja de existir interferencia y la transmisión se mantiene constante. La transmitancia se calcula a través del promedio de la función $\langle \sin^2\left(\frac{\omega n_2}{c} d\right) \rangle$, cuyo período está dado por $p = \frac{1}{n_2 d}$, este promedio se puede encontrar con la integral: $\langle f(x) \rangle = \frac{1}{P} \int_{x_0}^{x_0+P} f(x) dx$, para una función armónica en el tiempo $f(x)$.

El comportamiento de la transmitancia para ambos casos en términos de la longitud de onda λ es representado en la figura 2.

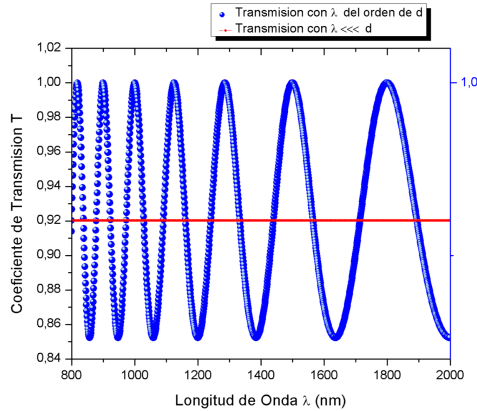


FIGURA 2. a) (Azul) Transmitancia obtenida por la relación (2) con $n_1 = 1,00029, n_2 = 1,5, d = 3000(\text{nm})$, b) (Rojo) Transmitancia obtenida por la relación (2) promediada con $n_1 = 1,00029, n_2 = 1,5, d = 1(\text{mm})$

Se puede apreciar como se obtiene un patrón de interferencia para el caso de película delgada a) y una transmitancia constante para

el caso de película gruesa b) o sustrato de vidrio de un milímetro de espesor, reportado como 0.92 [2].

4. Equivalencia entre los casos electrodinámicos y cuánticos

A partir de los casos descritos es posible establecer relaciones entre los fenómenos de propagación de ondas o partículas según sea el caso cuántico o electrodinámico. Para establecer formalmente dichas relaciones se tiene las siguientes analogías:

- (i) Sí la permitividad eléctrica de la placa ε_2 es mayor que la permitividad del medio incidente y transmitido, es decir, $\varepsilon_2 > \varepsilon_1$, éste fenómeno cumple el mismo rol de una partícula incidente sobre un pozo de potencial.
- (ii) Sí $\varepsilon_2 < \varepsilon_1$, este problema es análogo a una partícula incidiendo sobre una barrera de potencial.

4.1. Onda Plana Incidente Sobre una Interfase Dieléctrica y su Análogo Cuántico

Se considera ahora la propagación de una onda electromagnética plana con incidencia oblicua (θ) sobre una interfase dieléctrica, viajando entre dos medios caracterizados por diferentes permitividades ($\varepsilon_1, \varepsilon_2$) y permeabilidades ($\mu_1 = \mu_2 = 1$). El sistema de coordenadas se fija sobre la interfase que es perpendicular al eje z , la dirección de propagación de la onda electromagnética es perpendicular al eje y , la geometría de éste problema es mostrado en la figura 3, en donde, el vector de onda solo tiene dos componentes $\mathbf{k} = (k_x, 0, k_z)$.

Para encontrar los análogos, es necesario establecer primero las condiciones de frontera sobre la interfase, y ya que las componentes tangenciales de los vectores de onda son continuos, es decir, $k_{1x}^i = k_{1x}^r = k_{2x}^t$, los vectores de onda para cada medio se pueden expresar como [5]

$$\begin{aligned} \frac{n_1^2 \omega^2}{c^2} &= k_1^2 = k_x^2 + k_{1z}^2, & n_1 &= \sqrt{\varepsilon_1} \\ \frac{n_2^2 \omega^2}{c^2} &= k_2^2 = k_x^2 + k_{2z}^2, & n_2 &= \sqrt{\varepsilon_2} \end{aligned} \quad (3)$$

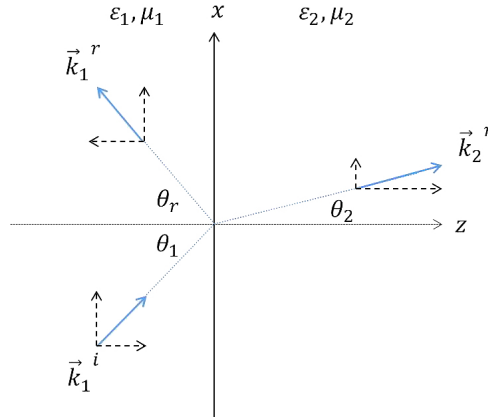


FIGURA 3. Vectores de onda para una onda electromagnética incidente sobre una interfase dieléctrica

restando las anteriores ecuaciones se encuentra

$$k_{1z}^2 - k_{2z}^2 = \frac{\omega^2}{c^2}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \quad (4)$$

para el caso de la *barrera de potencial* se tienen los vectores de onda k, q respectivamente,

$$k_{1z}^2 \equiv k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad k_{2z}^2 \equiv q^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \quad (5)$$

y su diferencia

$$k_{1z}^2 - k_{2z}^2 \equiv k^2 - q^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad (6)$$

entonces, la equivalencia se establece igualando (4) con (6), y se obtiene la primera analogía:

$$\boxed{\underbrace{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}_{\text{Cuántico}} \equiv \underbrace{\frac{\omega^2}{c^2}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}_{\text{Óptico}}} \quad (7)$$

Este resultado es obtenido al comparar la ecuación de onda de Helmholtz con la ecuación de onda de Schrödinger, en donde, la discontinuidad en el potencial que presencia la partícula al propagarse de un medio a otro, es equivalente a la diferencia de permitividades que presencia la onda electromagnética al

propagarse entre dos medios dieléctricos diferentes. Para establecer la relación de la energía incidente de la onda, se compara la relación de dispersión en la dirección z , para ambas regiones. Igualando las ecuaciones (3) y (5) se obtiene como resultado la segunda analogía:

$$\underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{\text{Cuántica}} \equiv \underbrace{\frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon_1 - k_x^2}_{\text{Óptica}} \quad (8)$$

ahora definiendo los parámetros adimensionales vistos en el sección dos $\left[(\eta = \frac{E}{V_0}), (\chi = \frac{2a}{\hbar} \sqrt{2mV_0}) \right]$, con su equivalente electrodinámico, y dividiendo las ecuaciones (8) entre (7) se encuentra así la tercera analogía:

$$\eta \equiv \underbrace{\frac{E}{V_0}}_{\text{Cuántico}} \equiv \underbrace{\frac{\frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon_1 - k_x^2}{\frac{\omega^2}{c^2}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}}_{\text{Óptico}} \quad (9)$$

haciendo uso de la ley de Snell, se puede conocer la componente del vector de onda k_{1x} , como $\frac{n_1\omega}{c} \sin \theta_1$ o $\frac{n_2\omega}{c} \sin \theta_2$, y bajo incidencia normal se tiene que $\theta_{1,2} = 0$, y por ende este término se anula de la anterior relación. Finalmente para encontrar el parámetro χ , se despeja V_0 de la ecuación (7), y se reemplaza en la definición de χ para el caso cuántico encontrando la cuarta analogía:

$$\chi = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mV_0}$$

$$\chi = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2m \left[\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\omega^2}{c^2} (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \right]}$$

con $a = d$ para el espesor de la barrera en el caso óptico se tiene

$$\chi \equiv \underbrace{\frac{a}{\hbar} \sqrt{2mV_0}}_{\text{Cuántico}} \equiv \underbrace{\frac{\omega \cdot d}{c} \sqrt{|\varepsilon_1 - \varepsilon_2|}}_{\text{Óptico}} \quad (10)$$

las analogías descritas en los apartados anteriores son mostradas en la Tabla 1.

| Término | Barrera-Pozo | Placa Dieléctrica |
|---|---|---|
| Ecuación de Onda | | |
| $\psi \equiv$ función de onda $\phi = \mathbf{E}, \mathbf{B}$ | $\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + K_c^2 \psi(x) = 0$ | $\frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x) + K_e^2 \phi(x) = 0$ |
| Relación de Dispersión | $K_q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E \pm V(x))}$ | $K_e = \frac{\omega n}{c}$ |
| Relación de energía | $\frac{2mE}{\hbar^2}$ | $\frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_1 - k_x^2$ |
| Discontinuidad | $\pm \frac{2mV_0}{\hbar^2}$ | $\frac{\omega^2}{c^2} (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)$ |
| Relación adimensional | $\eta \equiv \pm \frac{E}{V_0}$ | $\eta \equiv \frac{\pm \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_1 - k_x^2}{\frac{\omega^2}{c^2} (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}$ |
| Opacidad | $\chi^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2} V_0 $ | $\chi^2 = \frac{\omega^2 d^2}{c^2} \varepsilon_1 - \varepsilon_2 $ |

TABLA 1. *Análogos Cuánticos y Electrodinámicos*

Definidas estas relaciones, estas pueden ser comprobadas desde un punto de vista teórico, si se toma el resultado de transmisión para el caso cuántico y se sustituye en él los análogos ópticos η, χ , se llega al mismo resultado tradicionalmente resuelto desde las ecuaciones de Maxwell.

Como un primer ejemplo, a continuación se calcula el coeficiente de transmisión para el caso óptico utilizando los resultados de la barrera de potencial, donde $\eta > 1$ y $\eta = \frac{n_1^2}{n_1^2 - n_2^2}$, $\chi = \frac{\omega \cdot d}{c} \sqrt{|n_1^2 - n_2^2|}$, como $n_1 > n_2$, el valor absoluto $|n_1^2 - n_2^2| = n_1^2 - n_2^2$. Al reemplazar términos en la ecuación (1).

$$T = \frac{1}{1 + \left\{ 4 \left(\frac{n_1^2}{n_1^2 - n_2^2} \right) \left(\frac{n_1^2}{n_1^2 - n_2^2} - 1 \right) \right\}^{-1} \sin^2 \left(\frac{d\omega}{c} \sqrt{(n_1^2 - n_2^2)} \right) \sqrt{\left(\frac{n_1^2}{n_1^2 - n_2^2} - 1 \right)}}$$

que es justamente la ecuación (2)

$$T = \frac{1}{1 + \left(\frac{n_2^2 - n_1^2}{2n_1 n_2} \right)^2 \sin^2 \left(\frac{\omega n_2 d}{c} \right)}$$

A partir del pozo donde $\eta = \frac{-n_1^2}{n_1^2 - n_2^2}$ y $\chi = \frac{d\omega}{c} \sqrt{|n_1^2 - n_2^2|}$, como en éste caso $n_1 < n_2$, el valor absoluto $|n_1^2 - n_2^2| = -(n_1^2 - n_2^2)$, ahora

reemplazando nuevamente en (1).

$$T = \frac{1}{1 + \left\{ 4 \left(\frac{-n_1^2}{n_1^2 - n_2^2} \right) \left(\frac{-n_1^2}{n_1^2 - n_2^2} + 1 \right) \right\}^{-1} \sin^2 \left(\frac{d\omega}{c} \sqrt{-(n_1^2 - n_2^2)} \sqrt{\left(\frac{-n_1^2}{n_1^2 - n_2^2} - 1 \right)} \right)}$$

lo que finalmente conduce a la misma ecuación (2)

$$T = \frac{1}{1 + \left(\frac{n_2^2 - n_1^2}{2n_1 n_2} \right)^2 \sin^2 \left(\frac{\omega n_2}{c} d \right)}$$

Estos resultados son equivalentes con el caso óptico, y aunque la forma matemática es idéntica, la física de los fenómenos involucrados es completamente distinta; el espectro de transmisión para un pozo o barrera de potencial depende de la energía E de la partícula incidente sobre dicho potencial, por otro lado, el patrón de interferencia para el caso óptico depende de la relación del espesor de la placa con la longitud de onda incidente. Cuando el orden de estas es comparable existe interferencia (película delgada), en el caso contrario el valor para la transmisión permanece constante (película gruesa).

Si se varia el ángulo de incidencia sobre la placa dieléctrica, permaneciendo constante la longitud de onda se obtiene el patrón de interferencia Fabrit-Pérot para ángulos menores al ángulo crítico, y efecto tunel o transmisión nula para ángulos mayores al ángulo crítico, de forma análoga a la barrera para energías mayores y menores al potencial respectivamente[5].

5. Aspectos Teóricos - Experimentales

Como una aplicación se modela el sistema óptico *aire-película-sustrato-aire*, se calcula el coeficiente de transmisión y se muestran dos casos experimentales; su análogo cuántico es mostrado en la Figura 4.

A partir de las condiciones de frontera de la función de onda proveniente de la ecuación de Shrödinger, y de los vectores de onda en cada una de las regiones, se puede escribir la matriz de

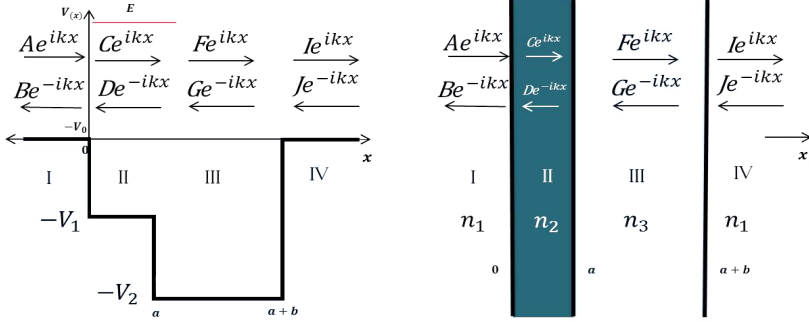


FIGURA 4. Modelo teórico para el caso de película sobre sustrato dieléctrico

transferencia como:

$$\begin{aligned}
 MT = \frac{1}{8k_3k_2k_1} & \begin{pmatrix} k_1 + k_3 & k_1 - k_3 \\ k_1 - k_3 & k_1 + k_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_3b} & 0 \\ 0 & e^{-ik_3b} \end{pmatrix} \\
 & \begin{pmatrix} k_3 + k_2 & k_3 - k_2 \\ k_3 - k_2 & k_3 + k_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_2a} & 0 \\ 0 & e^{-ik_2a} \end{pmatrix} \\
 & \begin{pmatrix} k_2 + k_1 & k_2 - k_1 \\ k_2 - k_1 & k_2 + k_1 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \quad (11)$$

y luego de realizar los respectivos productos matriciales para hallar el elemento que relaciona la transmisión, es decir, $T = |a_{11}|^{-2}$. Simplificando con el uso de la tabla 1, el coeficiente de transmisión toma la forma:

$$\begin{aligned}
 T_{\perp} = & \left\{ \cos^2 \left(\frac{\omega n_2}{c} a \right) \left\langle \cos^2 \left(\frac{\omega n_3}{c} b \right) \right\rangle + \right. \\
 & \frac{1}{4} \left[\frac{n_1^2 + n_2^2}{n_1 n_2} \right]^2 \sin^2 \left(\frac{\omega n_2}{c} a \right) \left\langle \cos^2 \left(\frac{\omega n_3}{c} b \right) \right\rangle + \\
 & \frac{1}{4} \left[\frac{n_1^2 + n_3^2}{n_1 n_3} \right]^2 \cos^2 \left(\frac{\omega n_2}{c} a \right) \left\langle \sin^2 \left(\frac{\omega n_3}{c} b \right) \right\rangle + \\
 & \frac{1}{4} \left[\frac{n_2^2 + n_3^2}{n_2 n_3} \right]^2 \sin^2 \left(\frac{\omega n_2}{c} a \right) \left\langle \sin^2 \left(\frac{\omega n_3}{c} b \right) \right\rangle + \\
 & \left. \frac{(n_1^2 - n_2^2)(n_1^2 - n_3^2)}{8n_1^2 n_2 n_3} \sin \left(2 \frac{\omega n_2}{c} a \right) \left\langle \sin \left(2 \frac{\omega n_3}{c} b \right) \right\rangle \right\}^{-1}
 \end{aligned} \quad (12)$$

observe que los términos promediados son los senos y cosenos que describen la transmisión dada por el sustrato de espesor b , y sin

promediar los términos asociados a la película delgada de espesor a . A continuación en la figura 5, se mostrará la transmisión para diferentes valores de espesores a , e índices de refracción reportados por GALIFA[2].

Al encontrar los respectivos valores medios y graficando la ecuación (12) con respecto a la longitud de onda incidente (λ), se obtiene la siguiente figura 5.

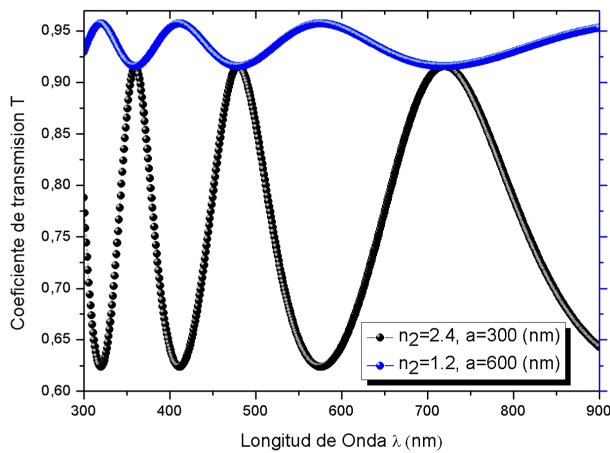


FIGURA 5. Transmitancia para una película dieléctrica inmersa en aire donde: $n_1 = 1,00029$, $n_2 = 2, 4; 1, 2$. $n_3 = 1,5$ $a = 300(nm); 600(nm)$, con $b = 1(mm)$

Ahora bien, aplicando el resultado teórico a medidas de transmitancia registradas en el laboratorio para la caracterización óptica de una película delgada de $ZnSe$, se busca modelar el espectro obtenido por métodos experimentales a través de la ecuación (12), con rangos de longitudes de onda incidentes de 800 a 2500 (nm), donde el valor del coeficiente de extinción k_s del vidrio o sustrato es prácticamente nulo y teniendo en cuenta un comportamiento cuasi-constante para el índice de refracción de la película semiconductorora y un débil coeficiente de absorción (α), se concluye que tanto la constante dieléctrica ϵ y el correspondiente índice de refracción a estas frecuencias pueden considerarse reales y aproximadamente constantes [2] [9], la Figura 6 presenta los espectros de transmisión experimental y teórico.

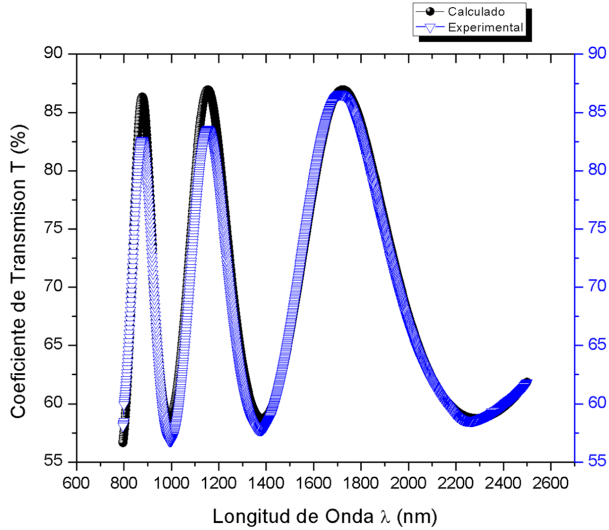


FIGURA 6. Espectro de transmisión experimental (azul) y teórico (negro) para un arreglo, aire-ZnSe-sustrato-aire con índices de refracción $n_1 = 1.00029$, $n_2 = 2.569$, $n_3 = 1.67$ y espesores $a = 680$ (nm) para la película semiconductor, y $b = 2$ (mm) para el sustrato.

6. Conclusiones

Se encontró que al describir la propagación de partículas y ondas sobre diferentes medios, clásicos o cuánticos se puede llegar a modelos análogos; se mostró que la escritura de los coeficientes de transmisión para estos dos sistemas son idénticos en su forma, aunque difieren en su interpretación Física. Desde el punto de vista cuántico los espectros de transmisión de electrones sobre una barrera de potencial dependen directamente de la energía con la cual inciden las partículas, obteniendo un patrón de interferencia para valores mayores al potencial de la barrera, y efecto túnel, para energías menores al potencial.

Clásicamente la transmisión de una onda electromagnética sobre una placa dieléctrica depende del ángulo con el cual se incide la onda y no directamente de la energía (manteniendo constante la longitud de onda). Así como el valor del potencial es un valor crítico V_0 en el caso cuántico, análogamente para una placa dieléctrica en el caso óptico existe un ángulo crítico, donde para valores menores

a este, existe transmisión e interferencia y en caso contrario para valores mayores no existirá transmisión, aunque es probable que ocurra efecto túnel para el caso electromagnético.

Se concluye que para ambos sistemas, el análogo es válido ya que al comparar con medidas experimentales de transmisión sobre una película delgada de *ZnSe* se obtiene el valor esperado del índice de refracción para este material en estas longitudes de onda $n_2 = 2,68$. También se obtuvo una relación válida para el coeficiente de transmisión paralelo al deducido por el grupo GALIFA de la Universidad de Barcelona, con la diferencia que el deducido en el presente trabajo se hizo a partir del método de la matriz de transferencia (MMT) presentando la ventaja que esté caracterizará todo el espectro de transmisión sin limitantes de frecuencias incidentes.

Referencias

- [1] J. Torres, J. Cisneros, G. Gordillo, and F. Alvarez, *Thin Solid Films* **289**, 238 (1996).
- [2] GILIFA, “Laboratorio de física de materiales dieléctricos y Ópticos,” (2016), universidad de Barcelona.
- [3] A. Z. Khachatryan, *Armenian J. Phys.* **3**, 064206 (2010).
- [4] P. Yeh, *Optical Waves in Layered Media*, Wiley Series in Pure and Applied Optics (Wiley, 2005).
- [5] P. Markos and C. Soukoulis, *Wave Propagation: From Electrons to Photonic Crystals and Left-Handed Materials* (Princeton University Press, 2008).
- [6] J. H. Vargas, R. E. Castiblanco, M. Cárdenas, and J. Morales, *Momento* **42**, 23 (2011).
- [7] L. Jelinek, J. D. Baena, J. Voves, and R. Marques, *New J. Phys.* **13**, 083011 (2011).
- [8] I. Hrebikova, L. Jelinek, J. Voves, and J. Baena, *Photonics Nanostruct.* **12**, 9 (2014).
- [9] R. Castiblanco, *Estudio de Cristales Fotónicos en 1D a través del Método de Matriz de Transferencia*, Tesis de maestría, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá - Colombia (2013).

BASES FOR QUANTUM ALGEBRAS AND SKEW POINCARÉ-BIRKHOFF-WITT EXTENSIONS

BASES PARA ÁLGEBRAS CUÁNTICAS Y EXTENSIONES TORCIDAS DE POINCARÉ-BIRKHOFF-WITT

Armando Reyes¹, Héctor Suárez²

¹ Departamento de Matemáticas, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

² Escuela de Matemáticas y Estadística, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia.

(Recibido: Septiembre/2016. Aceptado: Diciembre/2016)

Abstract

Considering quantum algebras and skew Poincaré-Birkhoff-Witt (PBW for short) extensions defined by a ring and a set of variables with relations between them, we are interested in finding a criteria and some algorithms which allow us to decide whether an algebraic structure, defined by variables and relations between them, can be expressed as a skew PBW extension, so that the base of the structure is determined. Finally, we illustrate our treatment with examples concerning quantum physics.

Keywords: Quantum algebras, skew Poincaré-Birkhoff-Witt extensions, diamond lemma.

Resumen

Para las álgebras cuánticas y las extensiones torcidas de Poincaré-Birkhoff-Witt definidas por un anillo y un conjunto de variables con relaciones entre ellas, estamos interesados en establecer un criterio y algunos algoritmos que nos permitan decidir si una estructura algebraica, definida en términos de generadores y

relaciones, puede expresarse como una extensión torcida de Poincaré-Birkhoff-Witt, de manera que se determine la base de la misma. Ilustramos nuestro tratamiento con diversas álgebras de la física cuántica.

Palabras clave: Álgebras cuánticas, extensiones torcidas de Poincaré-Birkhoff-Witt, lema del diamante.

Introduction

Historically, the importance of quantum algebras has been considered for several authors in the context of quantum mechanics, see [1] and [2]. For instance, in [3] it was presented a purely algebraic formulation of quantum mechanics which does not require the specification of a space of state vectors; rather, the required vector spaces can be identified as substructures in the algebra of dynamical variables (suitably extended for bosonic systems). As we can see, this formulation of quantum mechanics captures the undivided wholeness characteristic of quantum phenomena, and provides insight into their characteristic nonseparability and nonlocality. In fact, and like the authors say in [3], “the formalism we present fulfils Dirac’s aim of working with the algebra of quantum mechanics alone. Furthermore, this approach addresses Dirac’s interpretational difficulty, since it can be interpreted in terms of a “process” approach to quantum theory”.

Now, from a philosophical point of view, it is very important the new relationships between physics and mathematics that emerge with Heisenberg’s discovery of matrix mechanics and its development in the work of Born, Jordan, and Heisenberg himself. Precisely, this is the Einstein’s view of “the Heisenberg method”, as “a purely algebraic method of description of nature”. In [4], chapter 4, it is examined the shift from geometry to algebra in quantum mechanics as a reversal of the philosophy that governed classical mechanics by grounding it mathematically in the geometrical description of the behavior of physical objects in space and time (Heisenberg’s matrix mechanics abandons any attempts to develop this type of description and instead offers essentially algebraic

machinery for predicting the outcomes of experiments observed in measuring instruments).

One of the fundamental objects in quantum theory is the Heisenberg algebra (see [5] for a detailed exposition of this quantum algebra). This algebra and its generalizations - *deformations* - have recently become of interest in both theoretical physics and mathematics, where it is regarded as a fundamental object and as a suitable model for checking various physical and mathematical ideas and constructions (c.f. [6–15], and others). For example, in [15] it is discussed representations of the Heisenberg relation in various mathematical structures; in [12], it is investigated the structure of two-sided ideals - a key concept in noncommutative algebra - in the q -deformed Heisenberg algebras and the relationships of this algebra with the quantum plane, and its realizations are of primary importance to studying the dynamics of a q -deformed quantum system (see [11] for an exposition of the q -deformed Heisenberg algebra and its relation with the origin of q -calculus).

Actually, and following [14], “algebraic methods have long been applied to the solution of a large number of quantum physical systems. In the last decades, quantum algebras appeared in the framework of quantum integrable one-dimensional models and have ever since been applied to many physical phenomena [...] It was found that it could be generalized leading to the concept of deformed Heisenberg algebras [16], that have been used in many areas, as nuclear physics, condensed matter, atomic physics, etc”. Indeed, the algebraic approach in theoretical physics has been also considered in a possible reconciliation of the quantum mechanics with general relativity theory, where the gravity does not need to be quantized [17].

With this in mind, several families of algebras have been defined with the purpose of studying mathematical and physical properties of different algebraic systems. One of them are the skew Poincaré-Birkhoff-Witt extensions (PBW for short) introduced in [18]. These extensions have been studied in several papers ([18–28], and others), and the PhD Thesis [29], where the first author studied ring and module theoretical properties of these algebras.

Skew PBW extensions are defined by a ring and a set of variables with relations between them, (analogously to the definition of several quantum algebras, see [6, 8–10, 13, 30–32], and others). In the study of these algebras it is important to specify one basis for every one of them, since this allows us to characterize several properties with physical meaning. This can be appreciated in several works: in [33] it was considered the PBW theorem for quantized universal enveloping algebras; in [34] it was established the quantum PBW theorem for a wide class of associative algebras; in [35], it was studied the PBW bases for quantum groups using the notion of Hopf algebra, and in [36] it was considered this theorem for diffusion algebras. Following this idea, in this article we present a criteria and some algorithms which decide whether a given ring with some variables and relations can be expressed as a skew PBW extension with a basis in the sense of Definition 2.1. With this objective, our techniques used here are fairly standard and follow the same path as other text on the subject (see [37] and [29]). The results presented are new for skew PBW extensions and all they are similar to others existing in the literature (cf. [12, 15, 33, 35], and others).

The paper is organized as follows. Section 1 contains the criteria and algorithms of our treatment. Section 2 is dedicated to definition and some properties of skew PBW extensions. Section 3 presents two examples of quantum algebras which illustrate the results established in Section 1 (other examples can be found in [29]). Finally, we present some conclusions about this topic and a future work.

1. Diamond Lemma and PBW Bases

Bergman's Diamond Lemma [37] provides a general method to prove that certain sets are bases of algebras which are defined in terms of generators and relations. For instance, the Poincaré-Birkhoff-Witt theorem, which appeared at first for universal enveloping algebras of finite dimensional Lie algebras (see [30] for a detailed treatment) can be derived from it. PBW theorems have been considered several classes of commutative and

noncommutative algebras (see [33–36], and others). With this in mind, and since skew PBW extensions are defined by a ring and a set of variables with relations between them (Definition 2.1), in this section we establish a criteria and some algorithms which decide whether a given ring with some variables and relations can be expressed as a skew PBW extension. This answer is obtained following the original ideas presented in [37] and the treatment developed in [29].

- Definition 1.1.** (i) Let X be a non-empty set and denote by $\langle X \rangle$ and $R\langle X \rangle$ the free monoid on X and the free associative R -ring on X , respectively. A subset $Q \subseteq \langle X \rangle \times R\langle X \rangle$ is called a *reduction system* for $R\langle X \rangle$. An element $\sigma = (W_\sigma, f_\sigma) \in Q$ has components W_σ a word in $\langle X \rangle$ and f_σ a polynomial in $R\langle X \rangle$. Note that every reduction system for $R\langle X \rangle$ defines a factor ring $A = R\langle X \rangle / I_Q$, with I_Q the two-sided ideal of $R\langle X \rangle$ generated by the polynomials $W_\sigma - f_\sigma$, with $\sigma \in Q$.
- (ii) If σ is an element of a reduction system Q and $A, B \in \langle X \rangle$, the R -linear endomorphism $r_{A\sigma B} : R\langle X \rangle \rightarrow R\langle X \rangle$, which fixes all elements in the basis $\langle X \rangle$ different from $AW_\sigma B$ and sends this particular element to $Af_\sigma B$ is called a *reduction* for Q . If r is a reduction and $f \in R\langle X \rangle$, then f and $r(f)$ represent the same element in the R -ring $R\langle X \rangle / I_Q$. Thus, reductions may be viewed as rewriting rules in this factor ring.
- (iii) A reduction $r_{A\sigma B}$ acts trivially on an element $f \in R\langle X \rangle$ if $r_{A\sigma B}(f) = f$. An element $f \in R\langle X \rangle$ is said to be *irreducible* under Q if all reductions act trivially on f . Note that the set $R\langle X \rangle_{\text{irr}}$ of all irreducible elements of $R\langle X \rangle$ under Q is a left submodule of $R\langle X \rangle$.
- (iv) Let f be an element of $R\langle X \rangle$. We say that f *reduces* to $g \in R\langle X \rangle$, if there is a finite sequence r_1, \dots, r_n of reductions such that $g = (r_n \cdots r_1)(f)$. We will write $f \rightarrow_Q g$. A finite sequence of reductions r_1, \dots, r_n is said to be *final* on f , if $(r_n \cdots r_1)(f) \in R\langle X \rangle_{\text{irr}}$.
- (v) An element $f \in R\langle X \rangle$ is said to be *reduction-finite*, if for every infinite sequence r_1, r_2, \dots of reductions there

exists some positive integer m such that r_i acts trivially on the element $(r_{i-1} \cdots r_1)(f)$, for every $i > m$. If f is reduction-finite, then any maximal sequence of reductions r_1, \dots, r_n such that r_i acts non-trivially on the element $(r_{i-1} \cdots r_1)(f)$, for $1 \leq i \leq n$, will be finite. Thus, every reduction-finite element reduces to an irreducible element. We remark that the set of all reduction-finite elements of $R\langle X \rangle$ is a left submodule of $R\langle X \rangle$.

- (vi) An element $f \in R\langle X \rangle$ is said to be *reduction-unique* if it is reduction-finite and if its images under all final sequences of reductions coincide. This value is denoted by $r_Q(f)$.

Proposition 1.2 ([29], Lemma 3.1.2). (i) *The set $R\langle X \rangle_{\text{un}}$ of reduction-unique elements of $R\langle X \rangle$ is a left submodule, and $r_Q : R\langle X \rangle_{\text{un}} \rightarrow R\langle X \rangle_{\text{irr}}$ becomes an R -linear map.* (ii) *If $f, g, h \in R\langle X \rangle$ are elements such that ABC is reduction-unique for all terms A, B, C occurring in respectively f, g, h , then fgh is reduction-unique. Moreover, if r is any reduction, then $fr(g)h$ is reduction-unique and $r_Q(fr(g)h) = r_Q(fgh)$.*

Proof. (i) Consider $f, g \in R\langle X \rangle_{\text{un}}$, $\lambda \in R$. We know that $\lambda f + g$ is reduction-finite. Let r_1, \dots, r_m be a sequence of reductions (note that it is final on this element), and $r := r_m \cdots r_1$ for the composition. Using that f is reduction-unique, there is a finite composition of reductions r' such that $(r'r)(f) = r_Q(f)$, and in a similar way, a composition of reductions r'' such that $(r''r'r)(g) = r_Q(g)$. Since $r(\lambda f + g) \in R\langle X \rangle_{\text{irr}}$, then $r(\lambda f + g) = (r''r'r)(\lambda f + g) = \lambda(r''r'r)(f) + (r''r'r)(g) = \lambda r_Q(f) + r_Q(g)$. Hence, the expression $r(\lambda f + g)$ is uniquely determined, and $\lambda f + g$ is reduction-unique. In fact, $r_Q(\lambda f + g) = \lambda r_Q(f) + r_Q(g)$, and therefore (i) is proved.

(ii) From (i) we know that fgh is reduction-unique. Consider $r = r_{D\sigma E}$, for $\sigma \in Q$, $D, E \in \langle X \rangle$. The idea is to show that $fr(g)h$ is reduction-unique and $r_Q(fr(g)h) = r_Q(fgh)$. Note that if f, g, h are terms A, B, C , then $r_{AD\sigma EC}(ABC) = Ar_{D\sigma E}(B)C$, that is, $Ar_{D\sigma E}(B)C$ is reduction-unique with $r_Q(ABC) = r_Q(Ar_{D\sigma E}(B)C)$. Now, more generally, $f = \sum_i \lambda_i A_i$, $g = \sum_j \mu_j B_j$, $h = \sum_k \rho_k C_k$, where the indices i, j, k run over finite sets, with λ_i, μ_j, ρ_k , and where A_i, B_j, C_k are terms such that $A_i B_j C_k$ is reduction unique for

every i, j, k . In this way, $fr(g)h = \sum_{i,j,k} \lambda_i \mu_j \rho_k A_i r(B_j) C_k$. Finally, since $A_i r(B_j) C_k$ is reduction-finite for every i, j, k , and we have $r_Q(A_i r(B_j) C_k) = r_Q(A_i B_j C_k)$ from (i), $fr(g)h$ is reduction-unique and $r_Q(fr(g)h) = r_Q(fgh)$. \square

Proposition 1.3 ([29], Proposition 3.1.3). *If every element $f \in R\langle X \rangle$ is reduction-finite under a reduction system Q , and I_Q is the ideal of $R\langle X \rangle$ generated by the set $\{W_\sigma - f_\sigma \mid \sigma \in Q\}$ then $R\langle X \rangle = R\langle X \rangle_{\text{irr}} \oplus I_Q$ if and only if every element of $R\langle X \rangle$ is reduction-unique.*

Proof. Suppose that $R\langle X \rangle = R\langle X \rangle_{\text{irr}} \oplus I_Q$ and consider $f \in R\langle X \rangle$. Note that if $g, g' \in R\langle X \rangle$ are elements for which f reduces to g and g' , then $g - g' \in R\langle X \rangle \cap I_Q = \{0\}$, that is, f is reduction-unique. Conversely, if every element of $R\langle X \rangle$ is reduction-unique under Q , then $r_Q : R\langle X \rangle \rightarrow R\langle X \rangle_{\text{irr}}$ is a R -linear projection. Consider $f \in \ker(r_Q)$, that is, $r_Q(f) = 0$. Then $f \in I_Q$, whence the $\ker(r_Q) \subseteq I_Q$, but in fact, $\ker(r_Q)$ contains I_Q : for every $\sigma \in Q, A, B \in \langle X \rangle$, we have $r_Q(A(W_\sigma - f_\sigma)B) = r_Q(AW_\sigma B) - r_Q(Af_\sigma B) = 0$ from Proposition 1.2, when $r = r_{1\sigma 1}$. \square

Under the previous assumptions, $A = R\langle X \rangle / I_Q$ may be identified with the left free R -module $R\langle X \rangle_{\text{irr}}$ with R -module structure given by the multiplication $f * g = r_Q(fg)$.

Definition 1.4. An *overlap ambiguity* for Q is a 5-tuple of the form (σ, τ, A, B, C) , where $\sigma, \tau \in Q$ and $A, B, C \in \langle X \rangle \setminus \{1\}$ such that $W_\sigma = AB$ and $W_\tau = BC$. This ambiguity is *solvable* if there exist compositions of reductions r, r' such that $r(f_\sigma C) = r'(Af_\tau)$. Similarly, a 5-tuple (σ, τ, A, B, C) with $\sigma \neq \tau$ is called an *inclusion ambiguity* if $W_\tau = B$ and $W_\sigma = ABC$. This ambiguity is solvable if there are compositions of reductions r, r' such that $r(Af_\tau B) = r'(f_\sigma)$.

Definition 1.5. A partial monomial order \leq on $\langle X \rangle$ is said to be *compatible* with Q if f_σ is a linear combination of terms M with $M < W_\sigma$, for all $\sigma \in Q$.

Proposition 1.6 ([29], Proposition 3.1.6). *If \leq is a monomial partial order on $\langle X \rangle$ satisfying the descending chain condition and*

compatible with a reduction system Q , then every element $f \in R\langle X \rangle$ is reduction-finite. In particular, every element of $R\langle X \rangle$ reduces under Q to an irreducible element.

Let \leq be a monoid partial order on $\langle X \rangle$ compatible with the reduction system Q . Let M be a term in $\langle X \rangle$ and write Y_M for the submodule of $R\langle X \rangle$ spanned by all polynomials of the form $A(W_\sigma - f_\sigma)B$, where $A, B \in \langle X \rangle$ are such that $AW_\sigma B < M$. We will denote by V_M the submodule of $R\langle X \rangle$ spanned by all terms $M' < M$. Note that $Y_M \subseteq V_M$.

Definition 1.7. An overlap ambiguity (σ, τ, A, B, C) is said to be *resolvable* relative to \leq if $f_\sigma C - Af_\tau \in Y_{ABC}$. An inclusion ambiguity (σ, τ, A, B, C) is said to be *resolvable* relative to \leq if $Af_\tau C - f_\sigma \in Y_{ABC}$.

If r is a finite composition of reductions, and f belongs to V_M , then $f - r(f) \in Y_M$. Hence, $f \in Y_M$ if and only if $r(f) \in Y_M$ ([19], Proposition 3.1.8).

Proposition 1.8 (Bergman’s Diamond Lemma [37]; [29], Theorem 3.21). *Let Q be a reduction system for the free associative R -ring $R\langle X \rangle$, and let \leq be a monomial partial order on $\langle X \rangle$, compatible with Q and satisfying the descending chain condition. The following conditions are equivalent: (i) all ambiguities of Q are resolvable; (ii) all ambiguities of Q are resolvable relative to \leq ; (iii) all elements of $R\langle X \rangle$ are reduction-unique under Q ; (iv) $R\langle X \rangle = R\langle X \rangle_{\text{irr}} \oplus I_Q$.*

1.1. Algorithms

Throughout this section we will consider the lexicographical degree order \preceq_{deglex} to be defined on the variables x_1, \dots, x_n . For more details about these orders, see [18], section 3.

Definition 1.9. A reduction system Q for the free associative R -ring $R\langle x_1, \dots, x_n \rangle$ is said to be a \preceq_{deglex} -skew reduction system if the following conditions hold: (i) $Q = \{(W_{ji}, f_{ji}) \mid 1 \leq i < j \leq n\}$; (ii) for every $j > i$, $W_{ji} = x_j x_i$ and $f_{ji} = c_{i,j} x_i x_j + p_{ji}$, where $c_{i,j} \in R \setminus \{0\}$ and $p_{ji} \in R\langle x_1, \dots, x_n \rangle$; (iii) for each $j > i$, $\text{lm}(p_{ji}) \preceq_{\text{deglex}} x_i x_j$. We will denote $(Q, \preceq_{\text{deglex}})$ this type of reduction systems.

Note that if $0 \neq p \in \sum_{r_\alpha} x^\alpha$, $r_\alpha \in R$, we consider its *Newton diagram* as $\mathcal{N}(p) := \{\alpha \in \mathbb{N} \mid r_\alpha \neq 0\}$. Let $\exp(p) := \max \mathcal{N}(p)$. In this way, by Proposition 1.6 every element $f \in R\langle x_1, \dots, x_n \rangle$ reduces under Q to an irreducible element. Let I_Q be the two-sided ideal of $R\langle x_1, \dots, x_n \rangle$ generated by $W_{ji} - f_{ji}$, for $1 \leq i < j \leq n$. If $x_i + I_Q$ is also represented by x_i , for each $1 \leq i \leq n$, then we call *standard terms* in A . Proposition 1.11 below shows that any polynomial reduces under Q to some standard polynomial and hence standard terms in A generate this algebra as a left free R -module.

Proposition 1.10 ([29], Lemma 3.2.2). *If $(Q, \preceq_{\text{deglex}})$ is a skew reduction system, then the set $R\langle x_1, \dots, x_n \rangle_{\text{irr}}$ is the left submodule of $R\langle x_1, \dots, x_n \rangle$ consisting of all standard polynomials $f \in R\langle x_1, \dots, x_n \rangle$.*

Proof. It is clear that every standard term is irreducible. Now, let us see that if a monomial $M = \lambda x_{j_1} \cdots x_{j_s}$ is not standard, then some reduction will act non-trivially on it. If $s < 2$ the monomial is clearly standard. This is also true if $j_k \leq j_{k+1}$, for every $1 \leq k \leq s - 1$. Let $s \geq 2$. There exists k such that $j_k > j_{k+1}$ and $M = Cx_j x_i B = CW_{ji} B$ where $j = j_k$, $i = j_{k+1}$ and where C and B are terms. Then $CW_{ji} B \rightarrow_Q C f_{ji} B$ acts non trivially on M . \square

Proposition 1.11 ([29], Proposition 3.2.3). *If $(Q, \preceq_{\text{deglex}})$ is a skew reduction system for the set $R\langle x_1, \dots, x_n \rangle$, then every element of $R\langle x_1, \dots, x_n \rangle$ reduces under Q to a standard polynomial. Thus the standard terms in $A = R\langle x_1, \dots, x_n \rangle / I_Q$ span A as a left free module over R .*

Proof. It follows from Proposition 1.10 and Proposition 1.6. \square

Next, we present an algorithm to reduce any polynomial in $R\langle x_1, \dots, x_n \rangle$ to its standard representation modulo I_Q . The basic step in this algorithm is the reduction of terms to polynomials of smaller leading term. In the proof of Proposition 1.10 we can choose k to be the least integer such that $j_k > j_{k+1}$, thus yielding a procedure to define for every non-standard monomial λM a reduction denoted red that acts non-trivially on M . In this way,

the linear map $\text{red} : R\langle x_1, \dots, x_n \rangle \rightarrow R\langle x_1, \dots, x_n \rangle$ depends on M . However, the following procedure is an algorithm.

Algorithm: Monomial reduction algorithm

INPUT: $M = \lambda x_{j_1} \cdots x_{j_r}$ a non standard monomial.
OUTPUT: $p = \text{red}(M)$, a reduction under Q of the monomial M
INITIALIZATION: $k = 1, C = \lambda$
WHILE $j_k \leq j_{k+1}$ **DO**
 $C = Cx_{j_k}$
 $k = k + 1$
IF $k + 2 \leq r$ **THEN**
 $B = x_{j_{k+2}} \cdots x_{j_r}$
ELSE
 $B = 1$
 $j = j_k, i = j_{k+1}$
 $p = Cf_{j,i}B$.

An element $f \in R\langle x_1, \dots, x_n \rangle$ is called *normal* if $\deg(X_t) \preceq_{\text{deglex}} \deg(\text{lt}(f))$, for every term $X_t \neq \text{lt}(f)$ in f . (In Definition 2.4 we will see that elements of skew PBW extensions are normal).

Proposition 1.12 ([29], Proposition 3.2.4). *Let $(Q, \preceq_{\text{deglex}})$ be a skew quantum reduction system. There exists a R -linear map $\text{stred}_Q : R\langle x_1, \dots, x_n \rangle \rightarrow R\langle x_1, \dots, x_n \rangle_{\text{irr}}$ satisfying the following conditions: (i) for every $f \in R\langle x_1, \dots, x_n \rangle$, there exists a finite sequence r_1, \dots, r_m of reductions such that $\text{stred}_Q(f) = (r_m \cdots r_1)(f)$; (ii) if f is normal, then $\text{mdeg}(\text{lm}(f)) = \text{mdeg}(\text{lm}(\text{stred}_Q(f)))$.*

From the proof of Proposition 1.12 we obtain the next algorithm. Remark 1.13 and Theorem 1.14 are the key results connecting this section with skew PBW extensions.

Algorithm: Reduction to standard form algorithm

INPUT: f a non-standard polynomial.
OUTPUT: $g = \text{stred}_Q(f)$ a standard reduction under Q of f
INITIALIZATION: $g = 0$
WHILE $f \neq 0$ **DO**
IF $\text{lm}(f)$ is standard **THEN**
 $f = f - \text{lm}(f)$
 $g = g + \text{lm}(f)$
ELSE
 $f = f - \text{lm}(f) + \text{red}(\text{lm}(f))$.

Remark 1.13. *A free left R -module A is a skew PBW extension with respect to \preceq_{deglex} if and only if it is isomorphic to the quotient $R\langle x_1, \dots, x_n \rangle / I_Q$, where Q is a skew reduction system with respect to \preceq_{deglex} .*

By Proposition 1.8, the set of all standard terms forms a R -basis for $A = R\langle x_1, \dots, x_n \rangle / I_Q$. We have the following key result:

Theorem 1.14 ([29], Theorem 3.2.6). *Let $(Q, \preceq_{\text{deglex}})$ be a skew reduction system on $R\langle x_1, \dots, x_n \rangle$ and let $A = R\langle x_1, \dots, x_n \rangle / I_Q$. For $1 \leq i < j < k \leq n$, let g_{kji}, h_{kji} be elements in $R\langle x_1, \dots, x_n \rangle$ such that $x_k f_{ji}$ (resp. $f_{kj} x_i$) reduces to g_{kji} (resp. h_{kji}) under Q . The following conditions are equivalent:*

- (i) A is a skew PBW extension of R ;
- (ii) the standard terms form a basis of A as a left free R -module;
- (iii) $g_{kji} = h_{kji}$, for every $1 \leq i < j < k \leq n$;
- (iv) $\text{stred}_Q(x_k f_{ji}) = \text{stred}_Q(f_{kj} x_i)$, for every $1 \leq i < j < k \leq n$.

Moreover, if A is a skew PBW extension, then $\text{stred}_Q = r_Q$ and A is isomorphic as a left module to $R\langle x_1, \dots, x_n \rangle_{\text{irr}}$ whose module structure is given by the product $f * g := r_Q(fg)$, for every $f, g \in R\langle x_1, \dots, x_n \rangle_{\text{irr}}$.

Proof. The equivalence between (i) and (ii) as well between (i) and (iii) is given by Proposition 1.8. The equivalence between (i) and (iv) is obtained from Proposition 1.8 and Proposition 1.12. The remaining statements are also consequences of Proposition 1.8. \square

Theorem 1.14 gives an algorithm to check whether the algebraic structure $R\langle x_1, \dots, x_n \rangle / I_Q$ is a skew PBW extension since $\text{stred}_Q(x_k f_{ji})$ and $\text{stred}_Q(f_{kj} x_i)$ can be computed by means of Algorithm “Reduction to standard form algorithm”.

Remark 1.15. *In [38], it was also investigated the problem of determining if one quantum algebra have a PBW basis, and more specifically, if the algebra is a skew PBW extension, using different tools. In this sense, our Theorem 1.14 establishes an analogous result to [38], Theorem 2.4.*

2. Skew Poincaré-Birkhoff-Witt extensions

Skew PBW extensions introduced in [18] include many algebras of interest for modern mathematical physicists. As examples of these extensions, we mention the following: (a) the enveloping algebra of any finite-dimensional Lie algebra; (b) any differential operator formed from commuting derivations; (c) any Weyl algebra; (d) those differential operator rings $V(B, L)$ where L is a Lie algebra which is also a finitely generated free B -module equipped with a suitable Lie algebra map to derivations on B ; (e) the twisted or smash product differential operator ring involving finite-dimensional Lie algebras acting on a ring by derivations together with Lie 2-cocycles; (f) group rings of polycyclic by finite groups; (g) Ore algebras of injective type; (h) operator algebras; (i) diffusion algebras; (j) some quantum algebras; (k) quadratic algebras in 3 variables; (l) some types of Auslander-Gorenstein rings; (m) some skew Calabi-Yau algebras; (n) quantum polynomials, (o) some quantum universal enveloping algebras. A detailed list of examples of skew PBW extensions is presented in [29], [20] and [24].

Definition 2.1 ([18], Definition 1). Let R and A be rings. We say that A is a skew PBW extension of R (also called a σ -PBW extension of R), if the following conditions hold:

- (i) $R \subseteq A$;
- (ii) there exist elements $x_1, \dots, x_n \in A$ such that A is a left free R -module, with basis the basic elements $\text{Mon}(A) := \{x^\alpha = x_1^{\alpha_1} \cdots x_n^{\alpha_n} \mid \alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n) \in \mathbb{N}^n\}$.
- (iii) For each $1 \leq i \leq n$ and any $r \in R \setminus \{0\}$, there exists an element $c_{i,r} \in R \setminus \{0\}$ such that $x_i r - c_{i,r} x_i \in R$.
- (iv) For any elements $1 \leq i, j \leq n$, there exists $c_{i,j} \in R \setminus \{0\}$ such that $x_j x_i - c_{i,j} x_i x_j \in R + R x_1 + \cdots + R x_n$.

Under these conditions, we write $A := \sigma(R)\langle x_1, \dots, x_n \rangle$.

Proposition 2.2 ([18], Proposition 3). *Let A be a skew PBW extension of R . For each $1 \leq i \leq n$, there exists an injective*

endomorphism $\sigma_i : R \rightarrow R$ and an σ_i -derivation $\delta_i : R \rightarrow R$ such that $x_i r = \sigma_i(r)x_i + \delta_i(r)$, for each $r \in R$.

Two particular cases of skew PBW extensions are considered in the following definition.

Definition 2.3 ([18], Definition 4). Let A be a skew PBW extension of R . (a) A is called *quasi-commutative* if the conditions (iii) and (iv) in Definition 2.1 are replaced by (iii'): for each $1 \leq i \leq n$ and all $r \in R \setminus \{0\}$ there exists $c_{i,r} \in R \setminus \{0\}$ such that $x_i r = c_{i,r} x_i$; (iv'): for any $1 \leq i, j \leq n$ there exists $c_{i,j} \in R \setminus \{0\}$ such that $x_j x_i = c_{i,j} x_i x_j$; (b) A is called *bijective* if σ_i is bijective for each $1 \leq i \leq n$, and $c_{i,j}$ is invertible for any $1 \leq i < j \leq n$.

Definition 2.4 ([18], Definition 6). Let A be a skew PBW extension of R with endomorphisms σ_i , $1 \leq i \leq n$, as in Proposition 2.2.

- (i) For $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n) \in \mathbb{N}^n$, $\sigma^\alpha := \sigma_1^{\alpha_1} \cdots \sigma_n^{\alpha_n}$, $|\alpha| := \alpha_1 + \cdots + \alpha_n$. If $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_n) \in \mathbb{N}^n$; then $\alpha + \beta := (\alpha_1 + \beta_1, \dots, \alpha_n + \beta_n)$.
- (ii) For $X = x^\alpha \in \text{Mon}(A)$, $\exp(X) := \alpha$ and $\deg(X) := |\alpha|$. The symbol \succeq will denote a total order defined on $\text{Mon}(A)$ (a total order on \mathbb{N}_0^n). For an element $x^\alpha \in \text{Mon}(A)$, $\exp(x^\alpha) := \alpha \in \mathbb{N}_0^n$. If $x^\alpha \succeq x^\beta$ but $x^\alpha \neq x^\beta$, we write $x^\alpha \succ x^\beta$. Every element $f \in A$ can be expressed uniquely as $f = a_0 + a_1 X_1 + \cdots + a_m X_m$, with $a_i \in R \setminus \{0\}$, and $X_m \succ \cdots \succ X_1$. With this notation, we define $\text{lm}(f) := X_m$, the *leading monomial* of f ; $\text{lc}(f) := a_m$, the *leading coefficient* of f ; $\text{lt}(f) := a_m X_m$, the *leading term* of f ; $\exp(f) := \exp(X_m)$, the *order* of f ; and $E(f) := \{\exp(X_i) \mid 1 \leq i \leq t\}$. Note that $\deg(f) := \max\{\deg(X_i)\}_{i=1}^t$. Finally, if $f = 0$, then $\text{lm}(0) := 0$, $\text{lc}(0) := 0$, $\text{lt}(0) := 0$. We also consider $X \succ 0$ for any $X \in \text{Mon}(A)$. Again, for a detailed description of monomial orders in skew PBW extensions, see [18], Section 3.

3. Examples

In this section we present two examples of skew PBW extensions which illustrate the results of Section 1.1. Our aim is to show that several rings have a PBW basis in the sense of Definition 2.1. Other well known examples for quantum physics (Weyl algebras, quantum Weyl algebras, dispin algebras, Woronowicz algebra, skew polynomial rings, q -Heisenberg algebra, etc) can be realized following the ideas presented in this paper (see [29] for a detailed description of each one of these algebras).

Hayashi algebra

With the purpose of obtaining bosonic representations of the Drinfeld-Jimbo quantum algebras, Hayashi considered in [39] the \mathcal{A}_q^- algebra. Let us see its construction (we follow [34], Example 2.7.7). Let \mathbf{U} be the algebra generated by the indeterminates $\omega_1, \dots, \omega_n, \psi_1, \dots, \psi_n, \psi_1^*, \dots, \psi_n^*$, with the relations

$$\begin{aligned} \psi_j \psi_i - \psi_i \psi_j &= \psi_j^* \psi_i^* - \psi_i^* \psi_j^* = \omega_j \omega_i - \omega_i \omega_j = \psi_j^* \psi_i - \psi_i \psi_j^* = 0, & 1 \leq i < j \leq n, \\ \omega_j \psi_i - q^{-\delta_{ij}} \psi_i \omega_j &= \psi_j^* \omega_i - q^{-\delta_{ij}} \omega_i \psi_j^* = 0, & 1 \leq i, j \leq n, \\ \psi_i^* \psi_i - q^2 \psi_i \psi_i^* &= -q^2 \omega_i^2, & 1 \leq i \leq n. \end{aligned} \tag{3.1}$$

Let $x_1 := \omega_1, \dots, x_n := \omega_n, x_{n+1} := \psi_1, \dots, x_{2n} := \psi_n, x_{2n+1} := \psi_1^*, \dots, x_{3n} := \psi_n^*$. The relations (3.1) are equivalent to

$$\begin{aligned} x_j x_i - x_i x_j &= x_{n+j} x_{n+i} - x_{n+i} x_{n+j} = x_{2n+j} x_{2n+i} - x_{2n+i} x_{2n+j} = 0, & 1 \leq i < j \leq n, \\ x_{n+i} x_j - q^{\delta_{ij}} x_j x_{n+i} &= x_{2n+j} x_i - q^{-\delta_{ij}} x_i x_{2n+j} = 0, & 1 \leq i, j \leq n, \\ x_{2n+j} x_{n+i} &= x_{n+i} x_{2n+j}, & 1 \leq i < j \leq n, \\ x_{2n+i} x_{n+i} &= q^2 x_{n+i} x_{2n+i} - q^2 x_i^2, & 1 \leq i \leq n. \end{aligned}$$

Again, consider $x_1 \prec \dots \prec x_n \prec x_{n+1} \prec \dots \prec x_{2n} \prec x_{2n+1} \prec x_{3n}$. Then $(Q, \preceq_{\text{deglex}})$ is a skew reduction system, and we obtain the following cases:

- $1 \leq i < j < k \leq n$: $\text{stred}_Q(x_k f_{ji}) = x_k x_i x_j = x_i x_k x_j = x_i x_j x_k$,
 $\text{stred}_Q(f_{kj} x_i) = x_j x_k x_i = x_j x_i x_k = x_i x_j x_k$;
- $n+1 \leq i < j < k \leq 2n$: $\text{stred}_Q(x_k f_{ji}) = x_k x_i x_j = x_i x_k x_j = x_i x_j x_k$,
 $\text{stred}_Q(f_{kj} x_i) = x_j x_k x_i = x_j x_i x_k = x_i x_j x_k$;
- $2n+i \leq i < j < k \leq 3n$: $\text{stred}_Q(x_k f_{ji}) = x_k x_i x_j = x_i x_k x_j = x_i x_j x_k$,
 $\text{stred}_Q(f_{kj} x_i) = x_j x_k x_i = x_j x_i x_k = x_i x_j x_k$;

- $1 \leq i < j \leq n$ and $n + 1 \leq k \leq 2n$:
 - if $k = n + i$, then, $\text{stred}_Q(x_k f_{ji}) = x_k x_i x_j = q x_i x_k x_j = q x_i x_j x_k$,
 $\text{stred}_Q(f_{kj} x_i) = x_j x_k x_i = x_j q x_i x_k = q x_i x_j x_k$;
 - if $k \neq n + i$, $n + j$, then, $\text{stred}_Q(x_k f_{ji}) = x_k x_i x_j = x_i x_k x_j = x_i x_j x_k$,
 $\text{stred}_Q(f_{kj} x_i) = x_j x_k x_i = x_j x_i x_k = x_i x_j x_k$;
 - if $k = n + j$, then, $\text{stred}_Q(x_k f_{ji}) = x_k x_i x_j = x_i x_k x_j = x_i q x_j x_k = q x_i x_j x_k$,
 $\text{stred}_Q(f_{kj} x_i) = q x_j x_k x_i = q x_j x_i x_k = q x_i x_j x_k$;
- $1 \leq i < j \leq n$ and $2n + 1 \leq k \leq 3n$:
 - if $k = 2n + i$, then, $\text{stred}_Q(x_k f_{ji}) = x_k x_i x_j = q^{-1} x_i x_k x_j = q^{-1} x_i x_j x_k$,
 $\text{stred}_Q(f_{kj} x_i) = x_j x_k x_i = x_j q^{-1} x_i x_k = q^{-1} x_i x_j x_k$;
 - if $k \neq 2n + i$, $2n + j$, then, $\text{stred}_Q(x_k f_{ji}) = x_k x_i x_j = x_i x_k x_j = x_i x_j x_k$,
 $\text{stred}_Q(f_{kj} x_i) = x_j x_k x_i = x_j x_i x_k = x_i x_j x_k$;
 - if $k = 2n + j$, then, $\text{stred}_Q(x_k f_{ji}) = x_k x_i x_j = x_i x_k x_j = x_i q^{-1} x_j x_k = q^{-1} x_i x_j x_k$,
 $\text{stred}_Q(f_{kj} x_i) = q^{-1} x_j x_k x_i = q^{-1} x_j x_i x_k = q^{-1} x_i x_j x_k$;
- $1 \leq i \leq n$, $n + 1 \leq j \leq 2n$, $2n + 1 \leq k \leq 3n$:
 - if $j = n + i$ and $k = 2n + i$, then, $\text{stred}_Q(x_k f_{ji}) = x_k q x_i x_j = q q^{-1} x_i x_k x_j = x_i (q^2 x_j x_k - q^2 x_i^2) = q^2 x_i x_j x_k - q^2 x_i^3$,
 $\text{stred}_Q(f_{kj} x_i) = (q^2 x_j x_k - q^2 x_i^2) x_i = q^2 x_j x_k x_i - q^2 x_i^3 = q^2 x_i x_j x_k - q^2 x_i^3$;
 - if $j = n + i$ and $k \neq 2n + i$, then, $\text{stred}_Q(x_k f_{ji}) = x_k q x_i x_j = q x_i x_k x_j = q x_i x_j x_k$,
 $\text{stred}_Q(f_{kj} x_i) = x_j x_k x_i = x_j x_i x_k = q x_i x_j x_k$;
 - if $j \neq n + i$ and $k = 2n + i$, then, $\text{stred}_Q(x_k f_{ji}) = x_k x_i x_j = q^{-1} x_i x_k x_j = q^{-1} x_i x_j x_k$,
 $\text{stred}_Q(f_{kj} x_i) = x_j x_k x_i = x_j q^{-1} x_i x_k = q^{-1} x_i x_j x_k$;
 - if $j \neq n + i$ and $k \neq 2n + i$, then, $\text{stred}_Q(x_k f_{ji}) = x_k x_i x_j = x_i x_k x_j = x_i x_j x_k$,
 $\text{stred}_Q(f_{kj} x_i) = x_j x_k x_i = x_j x_i x_k = x_i x_j x_k$;
- $1 \leq i \leq n$ and $n + 1 \leq j < k \leq 2n$:
 - if $j = n + i$, then, $\text{stred}_Q(x_k f_{ji}) = x_k q x_i x_j = q x_i x_k x_j = q x_i x_j x_k$,
 $\text{stred}_Q(f_{kj} x_i) = x_j x_k x_i = x_j x_i x_k = q x_i x_j x_k$;

if $j, k \neq n + i$, then, $\text{stred}_Q(x_k f_{ji}) = x_k x_i x_j = x_i x_k x_j = x_i x_j x_k$,
 $\text{stred}_Q(f_{kj} x_i) = x_j x_k x_i = x_j x_i x_k = x_i x_j x_k$;

if $k = n + i$, then, $\text{stred}_Q(x_k f_{ji}) = x_k x_i x_j = q x_i x_k x_j = q x_i x_j x_k$,
 $\text{stred}_Q(f_{kj} x_i) = x_j x_k x_i = x_j q x_i x_k = q x_i x_j x_k$;

- $1 \leq i \leq n$ and $2n + 1 \leq j < k \leq 3n$,

if $j = 2n + i$, then, $\text{stred}_Q(x_k f_{ji}) = x_k q^{-1} x_i x_j = q^{-1} x_i x_k x_j = q^{-1} x_i x_j x_k$,

$\text{stred}_Q(f_{kj} x_i) = x_j x_k x_i = x_j x_i x_k = q^{-1} x_i x_j x_k$;

if $j, k \neq 2n + 1$, then, $\text{stred}_Q(x_k f_{ji}) = x_k x_i x_j = x_i x_k x_j = x_i x_j x_k$,
 $\text{stred}_Q(f_{kj} x_i) = x_j x_k x_i = x_j x_i x_k = x_i x_j x_k$;

if $k = 2n + 1$, then, $\text{stred}_Q(x_k f_{ji}) = x_k x_i x_j = q^{-1} x_i x_k x_j = q^{-1} x_i x_j x_k$,

$\text{stred}_Q(f_{kj} x_i) = x_j x_k x_i = x_j q^{-1} x_i x_j = q^{-1} x_i x_j x_k$;

- $n + 1 \leq i' := n + i \leq 2n$ and $2n + i \leq j < k \leq 3n$:

if $j = 2n + 1$, then, $\text{stred}_Q(x_k f_{ji'}) = x_k (q^2 x_{i'} x_j - q^2 x_i^2) = q^2 x_k x_{i'} x_j - q^2 x_k x_i^2 = q^2 x_{i'} x_j x_k - q^2 x_i^2 x_k$,

$\text{stred}_Q(f_{kj} x_{i'}) = x_j x_k x_{i'} = x_j x_{i'} x_k = (q^2 x_{i'} x_j - q^2 x_i^2) x_k = q^2 x_{i'} x_j x_k - q^2 x_i^2 x_k$;

if $j, k \neq 2n + 1$, then, $\text{stred}_Q(x_k f_{ji'}) = x_k x_{i'} x_j = x_{i'} x_k x_j = x_{i'} x_j x_k$,
 $\text{stred}_Q(f_{kj} x_{i'}) = x_j x_k x_{i'} = x_j x_{i'} x_k = x_{i'} x_j x_k$;

if $k = 2n + i$, then, $\text{stred}_Q(x_k f_{ji}) = x_k x_{i'} x_j = (q^2 x_{i'} x_k - q^2 x_i^2) x_j = q^2 x_{i'} x_j x_k - q^2 x_i^2 x_j$,

$\text{stred}_Q(f_{kj} x_i) = x_j x_k x_{i'} = x_j (q^2 x_{i'} x_k - q^2 x_i^2) = q^2 x_{i'} x_j x_k - q^2 x_i^2 x_j$;

- $n + 1 \leq i' := n + i < j \leq 2n$ and $2n + 1 \leq k \leq 3n$:

if $k = 2n + i$, then, $\text{stred}_Q(x_k f_{ji'}) = x_k x_{i'} x_j = (q^2 x_{i'} x_k - q^2 x_i^2) x_j = q^2 x_{i'} x_j x_k - q^2 x_i^2 x_j$,

$\text{stred}_Q(f_{kj} x_{i'}) = x_j x_k x_{i'} = x_j (q^2 x_{i'} x_k - q^2 x_i^2) = q^2 x_{i'} x_j x_k - q^2 x_i^2 x_j$;

if $k \neq 2n + i, 2n + j$, then, $\text{stred}_Q(x_k f_{ji}) = x_k x_{i'} x_j = x_{i'} x_k x_j = x_{i'} x_j x_k$,

$\text{stred}_Q(f_{kj} x_i) = x_j x_k x_{i'} = x_j x_{i'} x_k = x_{i'} x_j x_k$;

if $k = 2n + 1$, then, $\text{stred}_Q(x_k f_{ji}) = x_k x_{i'} x_j = (q^2 x_{i'} x_k - q^2 x_i^2) x_j = q^2 x_{i'} x_j x_k - q^2 x_i^2 x_j$,

$\text{stred}_Q(f_{kj} x_i) = x_j x_k x_{i'} = x_j (q^2 x_{i'} x_k - q^2 x_i^2) = q^2 x_{i'} x_j x_k - q^2 x_i^2 x_j$.

As we have seen, $\text{stred}_Q(x_k f_{ji}) = \text{stred}_Q(f_{kj} x_i)$, for every $1 \leq i < j < k \leq 3n$, so $\{\omega_1, \dots, \omega_n, \psi_1, \dots, \psi_n, \psi_1^*, \dots, \psi_n^*\}$ form a \mathbb{k} -basis of \mathbf{U} . Now, to obtain the Hayashi algebra \mathcal{A}_q^- , we take the field of the complex numbers and consider the multiplicative monoid \mathbf{S} generated by $\omega_1, \dots, \omega_n$. Since \mathbf{S} is a regular Ore set and the localization $\mathbf{S}^{-1}\mathbf{U}$ exists, then \mathcal{A}_q^- is $\mathbf{S}^{-1}\mathbf{U}$ modulo the ideal generated by $\psi_i \psi_i^* - q^2 \psi_i^* \psi_i \omega_i^{-2}$, for $i = 1, \dots, n$ (see [20], section 3.8, for localizations in skew PBW extensions).

Non-Hermitian realization of a Lie deformed, non-canonical Heisenberg algebra

In [6], it was studied the non-Hermitian realization of a Lie deformed, a non-canonical Heisenberg algebra, considering the case of operators A_j, B_k which are non-Hermitian (i.e., $\hbar = 1$)

$$\begin{aligned} A_j(1 + i\lambda_{jk})B_k - B_k(1 - i\lambda_{jk})A_j &= i\delta_{jk} \\ [A_j, B_k] &= 0 \quad (j \neq k) \\ [A_j, A_k] &= [B_j, B_k] = 0, \end{aligned} \quad (3.2)$$

and,

$$\begin{aligned} A_j^+(1 + i\lambda_{jk})B_k^+ - B_k^+(1 - i\lambda_{jk})A_j^+ &= i\delta_{jk} \\ [A_j^+, B_k^+] &= \hat{A}0 \quad (j \neq k), \\ [A_j^+, A_k^+] &= [B_j^+, B_k^+] = 0 \end{aligned} \quad (3.3)$$

where $A_j \neq A_j^+, B_k \neq B_k^+ (j, k = 1, 2, 3)$. If the operators A_j, B_k are in the form $A_j = f_j(N_j + 1)a_j, B_k = a_k^+ f_k(N_k + 1)$, where a_j, a_j^+ are leader operators of the usual Heisenberg-Weyl algebra, with N_j the corresponding number operator ($N_j = a_j^+ a_j, N_j |n_j\rangle = n_j |n_j\rangle$), and the structure functions $f_j(N_j + 1)$ complex, then it is showed in [6] that A_j and B_k are given by

$$\begin{aligned} A_j &= \sqrt{\frac{i}{1 + i\lambda_j}} \left(\frac{[(1 - i\lambda_j)/(1 + i\lambda_j)]^{N_j + 1} - 1}{(1 - i\lambda_j)/(1 + i\lambda_j) - 1} \frac{1}{N_j + 1} \right)^{\frac{1}{2}} a_j \\ B_k &= \sqrt{\frac{i}{1 + i\lambda_k}} a_k^+ \left(\frac{[(1 - i\lambda_k)/(1 + i\lambda_k)]^{N_k + 1} - 1}{(1 - i\lambda_k)/(1 + i\lambda_k) - 1} \frac{1}{N_k + 1} \right)^{\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Next, we show that this algebra is a skew PBW extension of a field \mathbb{k} . Let $x_1 := B_1$, $x_2 := B_2$, $x_3 := B_3$, $x_4 := A_1$, $x_5 := A_2$, and $x_6 := A_3$. Under these identifications, the relations (3.2) are equivalent to the following:

$$\begin{aligned}
x_2x_1 &= x_1x_2, & x_3x_1 &= x_1x_3, & x_4x_1 &= \frac{1-i\lambda_{11}}{1+i\lambda_{11}}x_1x_4+i, \\
x_5x_1 &= x_1x_5, & x_6x_1 &= x_1x_6, & x_5x_2 &= \frac{1-i\lambda_{22}}{1+i\lambda_{22}}x_2x_5+i \\
x_3x_2 &= x_2x_3, & x_4x_2 &= x_2x_4, & x_6x_3 &= \frac{1-i\lambda_{33}}{1+i\lambda_{33}}x_3x_6+i \\
x_5x_3 &= x_3x_5, & x_6x_2 &= x_2x_6, & x_4x_3 &= x_3x_4 \\
x_5x_4 &= x_4x_5, & x_6x_4 &= x_4x_6, & x_6x_5 &= x_5x_6.
\end{aligned}$$

Then,

$$\begin{aligned}
\text{stred}_Q(x_3f_{21}) &= x_3x_1x_2 = x_1x_3x_2 = x_1x_2x_3 \\
\text{stred}_Q(f_{32}x_1) &= x_2x_3x_1 = x_2x_1x_3 = x_1x_2x_3 \\
\text{stred}_Q(x_4f_{32}) &= x_4x_2x_3 = x_2x_4x_3 = x_2x_3x_4 \\
\text{stred}_Q(f_{43}x_2) &= x_3x_4x_2 = x_3x_2x_4 = x_2x_3x_4 \\
\text{stred}_Q(x_4f_{21}) &= x_4x_1x_2 = \left(\frac{1-i\lambda_{11}}{1+i\lambda_{11}}x_1x_4+i\right)x_2 \\
&= \frac{1-i\lambda_{11}}{1+i\lambda_{11}}x_1x_4x_2+ix_2 = \frac{1-i\lambda_{11}}{1+i\lambda_{11}}x_1x_2x_4+ix_2 \\
\text{stred}_Q(f_{42}x_1) &= x_2x_4x_1 = x_2\left(\frac{1-i\lambda_{11}}{1+i\lambda_{11}}x_1x_4+i\right) \\
&= \hat{A}x_2x_1\frac{1-i\lambda_{11}}{1+i\lambda_{11}}x_4+ix_2 = \frac{1-i\lambda_{11}}{1+i\lambda_{11}}x_1x_2x_4+ix_2 \\
\text{stred}_Q(x_5f_{43}) &= x_5x_3x_4 = x_3x_5x_4 = x_3x_4x_5 \\
\text{stred}_Q(f_{54}x_3) &= x_4x_5x_3 = x_4x_3x_5 = x_3x_4x_5 \\
\text{stred}_Q(x_5f_{32}) &= x_5x_2x_3 = \left(\frac{1-i\lambda_{22}}{1+i\lambda_{22}}x_2x_5+i\right)x_3 \\
&= \frac{1-i\lambda_{22}}{1+i\lambda_{22}}x_2x_5x_3+ix_3 = \frac{1-i\lambda_{22}}{1+i\lambda_{22}}x_2x_3x_5+ix_3 \\
\text{stred}_Q(f_{53}x_2) &= x_3x_5x_2 = x_3\left(\frac{1-i\lambda_{22}}{1+i\lambda_{22}}x_2x_5+i\right) \\
&= \frac{1-i\lambda_{22}}{1+i\lambda_{22}}x_3x_2x_5+ix_3 = \frac{1-i\lambda_{22}}{1+i\lambda_{22}}x_2x_3x_5+ix_3
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{stred}_Q(x_5 f_{21}) &= x_5 x_1 x_2 = x_1 x_5 x_2 = x_1 \left(\frac{1 - i\lambda_{22}}{1 + i\lambda_{22}} x_2 x_5 + i \right) \\
&= \frac{1 - i\lambda_{22}}{1 + i\lambda_{22}} x_1 x_2 x_5 + i x_1 \\
\text{stred}_Q(f_{52} x_1) &= \left(\frac{1 - i\lambda_{22}}{1 + i\lambda_{22}} x_2 x_5 + i \right) x_1 = \frac{1 - i\lambda_{22}}{1 + i\lambda_{22}} x_2 x_5 x_1 + i x_1 \\
&= \hat{A} \frac{1 - i\lambda_{22}}{1 + i\lambda_{22}} x_1 x_2 x_5 + i x_1 \\
\text{stred}_Q(x_6 f_{54}) &= x_6 x_5 x_4 = x_4 x_6 x_5 = x_4 x_5 x_6 \\
\text{stred}_Q(f_{65} x_4) &= x_5 x_6 x_4 = x_5 x_4 x_6 = x_4 x_5 x_6 \\
\text{stred}_Q(x_6 f_{43}) &= x_6 x_3 x_4 \left(\frac{1 - i\lambda_{33}}{1 + i\lambda_{33}} x_3 x_6 + i \right) x_4 = \frac{1 - i\lambda_{33}}{1 + i\lambda_{33}} x_3 x_6 x_4 + i x_4 \\
&= \frac{1 - i\lambda_{33}}{1 + i\lambda_{33}} x_3 x_4 x_6 + i x_4, \\
\text{stred}_Q(f_{64} x_3) &= x_4 x_6 x_3 = x_4 \left(\frac{1 - i\lambda_{33}}{1 + i\lambda_{33}} x_3 x_6 + i \right) = \frac{1 - i\lambda_{33}}{1 + i\lambda_{33}} x_4 x_3 x_6 + i x_4 \\
&= \frac{1 - i\lambda_{33}}{1 + i\lambda_{33}} x_3 x_4 x_6 + i x_4 \\
\text{stred}_Q(x_6 f_{32}) &= x_6 x_2 x_3 = x_2 x_6 x_3 = x_2 \left(\frac{1 - i\lambda_{33}}{1 + i\lambda_{33}} x_3 x_6 + i \right) \\
&= \frac{1 - i\lambda_{33}}{1 + i\lambda_{33}} x_2 x_3 x_6 + i x_2 \\
\text{stred}_Q(f_{63} x_2) &= \left(\frac{1 - i\lambda_{33}}{1 + i\lambda_{33}} x_3 x_6 + i \right) x_2 = \frac{1 - i\lambda_{33}}{1 + i\lambda_{33}} x_3 x_6 x_2 + i x_2 \\
&= \frac{1 - i\lambda_{33}}{1 + i\lambda_{33}} x_2 x_3 x_6 + i x_2 \\
\text{stred}_Q(x_6 f_{21}) &= x_6 x_1 x_2 = x_1 x_6 x_2 = x_1 x_2 x_6 \\
\text{stred}_Q(f_{62} x_1) &= x_2 x_6 x_1 = x_2 x_1 x_6 = x_1 x_2 x_6.
\end{aligned}$$

Since $\text{stred}_Q(x_k f_{ji}) = \text{stred}_Q(f_{kj} x_i)$, for every $1 \leq i < j < k \leq 6$, then the elements $B_1^{a_1}, B_2^{a_2}, B_3^{a_3}, A_1^{a_4}, A_2^{a_5}$ and $A_3^{a_6}$, $a_i \in \mathbb{N}$, for every i , form a basis of the Lie-deformed Heisenberg algebra, and from (3.2), we can see that this algebra is a skew PBW extension over the complex numbers.

Conclusions and future work

In this paper, we have presented a criteria to determine whether an algebra defined by generators and relations can be expressed as a skew PBW extension. Nevertheless, since the limited size of the paper, there are a lot of remarkable algebras of the theoretical physics which are skew PBW extensions and were not illustrated here (see [29] for more examples). As a future work, we will investigate a theory of PBW bases for another kinds of quantum algebras more general than skew PBW extensions over fields. The techniques to be used will concern noncommutative differential geometry (see [27]) with the aim of characterizing algebras arising in geometries of noncommutative spaces and their interactions with quantum physics, in the sense of [40], [41], and others.

Acknowledgment

The first author is supported by Grant HERMES CODE 30366, Departamento de Matemáticas, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá.

References

- [1] P. A. M. Dirac, Proc. Camb. Phil. Soc. **23**, 412 (1926).
- [2] H. Weyl, *Gruppentheorie und Quantenmechanik (English Edition)* (Dover, 1932).
- [3] N. A. M. Monk and B. J. Hiley, Found. Phys. Lett. **11**, 371 (1998).
- [4] A. Plotnitsky, *Epistemology and Probability. Bohr, Heisenberg, Schrödinger, and the Nature of Quantum-Theoretical Thinking. Fundamental Theories of Physics 161* (Springer, 2010).
- [5] V. S. Varadarajan, *Reflections on Quanta, Symmetries, and Supersymmetries* (Springer, 2011).
- [6] A. Jannussis, A. Leodaris, and R. Mignani, Phys. Lett. A **197**, 187 (1995).
- [7] A. Turbiner, Funct. Anal. Appl. **29**, 291 (1995).

- [8] M. Pillin, *Commun. Math. Phys* **180**, 23 (1996).
- [9] H. Y. Pan and Z. S. Zhao, *Phys. Lett. A* **282**, 251 (2001).
- [10] H. Y. Pan and Z. S. Zhao, *Phys. Lett. A* **312**, 1 (2003).
- [11] P. Narayama, *Physica A* **328**, 145 (2003).
- [12] L. Hellstrom and S. Silvestrov, *Expo. Math.* **23**, 99 (2005).
- [13] J. Douari, *Int. J. Theor. Phys* **45**, 893 (2006).
- [14] E. M. F. Curado, Y. Hassouni, M. A. Rego-Monteiro, and L. M. C. S. Rodrigues, *Phys. Lett. A* **372**, 3350 (2008).
- [15] L. Zhe, *Sci. China Math.* **541**, 2427 (2011).
- [16] M. Arik and D. D. Coon, *J. Math. Phys.* **17**, 524 (1976).
- [17] D. A. Slavnov, *Theoret. Math. Phys.* **171**, 848 (2012).
- [18] C. Gallego and O. Lezama, *Commun. Algebra* **39**, 50 (2011).
- [19] A. Reyes, *Rev. Col. Mat.* **47**, 95 (2013).
- [20] O. Lezama and A. Reyes, *Commun. Algebra* **42** (1200-1230).
- [21] A. Reyes, *Rev. Col. Mat.* **48**, 79 (2014).
- [22] A. Reyes, *Rev. Integr. Temas Mat.* **33**, 173 (2015).
- [23] O. Lezama, J. P. Acosta, and A. Reyes, *Rev. Un. Mat. Argentina* **56**, 39 (2015).
- [24] H. Suárez, O. Lezama, and A. Reyes, *Ciencia en Desarrollo* **6**, 205 (2015).
- [25] A. Reyes and H. Suárez, *Bol. Mat.* **23**, 71 (2016).
- [26] A. Reyes and H. Suárez, *Rev. Integr. Temas Mat.* **34**, 147 (2016).
- [27] A. Reyes and H. Suárez, *Ciencia en Desarrollo* **7**, 99 (2016).
- [28] H. Suárez and A. Reyes, *Far East J. Math. Sci. (FJMS)* **101**, 301 (2017).
- [29] A. Reyes, *Ring and Module Theoretical Properties of Skew PBW Extensions*, Ph.D. thesis, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá - Colombia (2013).
- [30] J. Dixmier, *Enveloping Algebras* (Graduate Studies in Mathematics, American Mathematical Society, 1996).
- [31] H. Gausterer, H. Grosse, and L. E. Pittner, *Geometry and Quantum Physics, Lecture Notes in Physics, Proceedings, Schladming, Austria* (Springer-Verlag, 2000).

- [32] M. Rosenbaun and J. D. Vergara, *Gen. Relativ. Gravit.* **38**, 607 (2006).
- [33] H. A. Yamane, *Publ. RIMS Kyoto Univ.* **25**, 503 (1989).
- [34] R. Berger, *Comm. Math. Physics* **143**, 215 (1992).
- [35] C. M. Ringel, *J. Reine Angew. Math.* **470**, 51 (1996).
- [36] O. Hinchcliffe, *Diffusion Algebras*, Ph.D. thesis, University of Sheffield, Sheffield, South Yorkshire – England (2005).
- [37] G. M. Bergman, *Adv. Math.* **29**, 178 (1978).
- [38] J. P. Acosta and O. Lezama, *Alg. Dis. Math.* **20**, 1 (2015).
- [39] T. Hayashi, *Commun. Math. Phys* **127**, 129 (1990).
- [40] H. Gausterer, H. Grosse, and L. E. Pittner, *Geometry and Quantum Physics, Lecture Notes in Physics, Proceedings of the 38. Internationale Universitätswochen für Kern-und Teilchenphysik, Schladming, Austria, January* (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 200).
- [41] M. Marcolli and D. E. Parashar, *Quantum Groups and Noncommutative Spaces, Perspectives on Quantum Geometry* (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2011).

DELINQUIR O NO DELINQUIR. UN MODELO DE REDES DELINCUENCIALES Y UN ALGORITMO PARA SU ANÁLISIS

TO COMMIT OR NOT TO COMMIT A CRIME. A CRIMINAL NETWORK MODEL AND AN ALGORITHM FOR ITS ANALYSIS

Fredis Agámez, John F. Cantillo, Javier Montoya, John E. Realpe

Grupo de Modelado Computacional (GruMoC), Instituto de Matemáticas Aplicadas,
Universidad de Cartagena, Colombia.

(Recibido: Septiembre/2016. Aceptado: Enero/2017)

Resumen

En este trabajo se propone e investiga un modelo matemático de redes delincuenciales. Este problema se formula en el marco de la teoría de juegos, uno de cuyos conceptos principales es el de equilibrio de Nash. Se discute cómo el problema de encontrar un equilibrio de Nash da lugar a un problema de satisfacción de restricciones y cómo éste se puede analizar usando métodos de la mecánica estadística, cuya formalización matemática es un tema de investigación muy activo en la actualidad. Desde el punto de vista computacional, tales métodos dan lugar a algoritmos de paso de mensajes que permiten obtener propiedades estadísticas de interés, tales como el nivel de actividad delincriminal promedio y el número de equilibrios de Nash.

Palabras clave: Sistemas complejos, teoría de juegos, modelado computacional, modelos en redes, teoría de probabilidad, redes delincuenciales, mecánica estadística.

Abstract

Here we introduce and investigate a mathematical model of delinquent networks. This problem is formulated in the framework of game theory, one of whose main concepts is the Nash equilibrium. We discuss how the problem of finding a Nash equilibrium leads to a constraint satisfaction problem, and how it can be analyzed using methods of statistical mechanics whose mathematical formalization is a very active research topic today. From the computational point of view, such methods give rise to algorithms of passage of messages that allow to obtain statistical properties of interest, such as the level of average delinquency activity and the number of Nash equilibria.

Keywords: Complex systems, game theory, computational modeling, networks models, probability theory, delinquent networks, statistical mechanics.

1. Introducción

En la actualidad las fronteras entre las disciplinas se tornan cada vez más tenues a medida que se reconoce el carácter interdisciplinar de los diversos fenómenos que ocurren en nuestro entorno. Es así como hoy por hoy las llamadas “ciencias duras”, tales como la matemática y la física, cada vez extienden más su rango de aplicación consolidando un conjunto de técnicas y conceptos que se han venido agrupando en la denominada teoría de sistemas complejos. Todo esto adquiere aún más relevancia con la creciente capacidad de adquisición de datos reales [1, 2] que, debido a su inmenso potencial, han recibido el apelativo de “el nuevo petróleo” [3]. Así mismo esto constituye una importante oportunidad para los países en vía de desarrollo de apoyar decididamente las ciencias básicas al mismo tiempo que se buscan soluciones a problemas urgentes de una nación, lo que usualmente son percibidos como objetivos opuestos que compiten por los recursos limitados de ésta. El estudio de fenómenos socioeconómicos, como lo son la delincuencia y la corrupción, desde la perspectiva de las ciencias de la complejidad son un ejemplo de ello [4, 5].

En efecto, una red delincencial puede ser vista como un sistema de múltiples agentes interactuantes que puede formularse dentro del marco conceptual de la teoría de juegos [6]. En esta teoría se asume que los agentes son autónomos y que pueden tener objetivos conflictivos, de modo que cada agente busca obtener lo mejor para sí condicionado al comportamiento estratégico de los demás agentes, y condicionando a su vez, el comportamiento de los mismos [6, 7]. Las diferentes estrategias que un agente puede asumir pueden representarse por variables numéricas, y las preferencias de un agente dado pueden codificarse en una *función de utilidad*, o matriz de pagos, la cual asigna un número a cada configuración de estrategias del agente en cuestión y de la de los demás agentes involucrados. Una configuración de estrategias en la cual todos los agentes están satisfechos, en el sentido de que ninguno tiene un incentivo unilateral (de acuerdo a sus preferencias) de cambiar de estrategias, se conoce como equilibrio de Nash, y constituye el concepto de solución en el cual se concentra este trabajo.

En este estudio se investiga un modelo de redes delincuenciales que consiste de un conjunto de individuos situados en los nodos de una red que pueden decidir si delinquir o no. Un vínculo entre un par de nodos en esta red indica que los individuos correspondientes tienen una influencia mutua en sus decisiones. Las preferencias de un agente dado están codificadas en su función de pagos, la cual representa la relación costo-beneficio caracterizada por el balance entre las ganancias obtenidas de su actividad criminal y las consecuencias de que sea capturado. El modelo se construye en analogía con un modelo propuesto recientemente en la literatura de las ciencias socioeconómicas [8] e investigado por algunos de los autores en Bahoque et al. [9]). La principal diferencia reside en el tipo de información que se tiene sobre el sistema. En efecto, mientras que en Ballester et al. [8] se asume que se conoce el *nivel de actividad delincencial* de cada individuo en la red, el cual se modela como un número real que podría estimarse, por ejemplo, con la frecuencia con la que un individuo dado delinque en una cierta ventana de tiempo, aquí se asume una situación que puede considerarse más realista en la cual solo se tiene información sobre si un determinado individuo delinque o no. Desde un punto de

vista matemático, hay una diferencia importante entre trabajar con variables reales y trabajar con variables discretas, en esta caso binarias (delinquir o no). En efecto, en el primer caso se puede recurrir a las técnicas analíticas del cálculo, mientras que el segundo caso corresponde a un problema combinatorio más cercano a la lógica subyacente a la ciencia de la computación.

Recientemente se ha encontrado que los métodos matemáticos y computacionales de la mecánica estadística, que inicialmente podrían entenderse como una colección de ideas heurísticas, resultan muy efectivos para el análisis de problemas combinatorios de diversa índole [10]. Este éxito, a su vez, ha atraído gran interés por parte de los matemáticos, quienes han venido contribuyendo a formalizar estas ideas sobre bases matemáticas sólidas [11–14]. En el caso de las redes delincuenciales que se estudian en este trabajo, dicha conexión con la mecánica estadística surge al considerar el sistema de agentes como un sistema de partículas que interactúan entre sí. El estado de una de tales partículas corresponde a la estrategia del agente que representa, y a cada configuración de estrategias se le puede asociar una función de energía apropiada, de manera que las configuraciones de interés, como por ejemplo los equilibrios de Nash, correspondan a las configuraciones de mínima energía. Una vez se tiene este mapa, el problema se traduce en el estudio de la distribución de Boltzmann asociada a dicho sistema de partículas. Uno de los métodos más importantes para el estudio de la distribución de Boltzmann de sistemas definidos sobre grafos es conocido como el método de la cavidad, el cual puede interpretarse como un marco conceptual que facilita el desarrollo de algoritmos de paso de mensajes [15–17].

En la siguiente sección se introduce el modelo a estudiar y se define el problema de encontrar un equilibrio de Nash como un problema de satisfacción de restricciones. En la sección 4 se discute como los métodos matemáticos y computacionales de la mecánica estadística pueden utilizarse para el análisis de este problema. Esta sección puede tomarse como una introducción a estas ideas que se han venido constituyendo en un área de estudio importante de las matemáticas en la actualidad. Finalmente, en las secciones 6 y 7 se

presentan los resultados obtenidos y las conclusiones del estudio, respectivamente.

2. Definición del modelo: Delinquir o no delinquir

Como se mencionó anteriormente, el modelo aquí propuesto se basa en el modelo de Ballester et al. [8] que ha sido estudiado recientemente en Bahoque et al. [9]. Sin embargo en este trabajo, en contraste con el modelo de Ballester et al, las variables son binarias y por lo tanto se deben utilizar otro tipo de técnicas, más cercanas a la matemática discreta, que están siendo desarrolladas activamente en la actualidad. La presentación del modelo será por lo tanto necesariamente similar a la de [9] aunque en el proceso se enfatizarán algunas diferencias. Estudios preliminares sugieren que la topología de las redes delincuenciales se aproxima a la de las redes complejas [18], sin embargo, aquí se utilizaron grafos aleatorios con el fin de simplificar este primer estudio sobre el tema. También es importante anotar que nuestro método es independiente de la interpretación que se le pueda dar a cada parámetro, pero conociendo relaciones causales entre aquellas características específicas que representan los parámetros y las variables de salida del modelo tendríamos capacidad de predicción y de control.

Una red delincencial g se define mediante un conjunto $N = \{1, \dots, n\}$ de individuos idénticos y un conjunto de vínculos entre ellos. Esta se puede describir asociando una variable binaria g_{ij} a cada par de individuos i y j en la red, tal que $g_{ij} = 1$ si y sólo si i y j interactúan, o se influyen, directamente, y $g_{ij} = 0$ de otro modo. La matriz G con componentes g_{ij} se conoce como la matriz de adyacencia de la red. Cada individuo i en la red tiene asociada una variable binaria x_i tal que $x_i = 1$ si el individuo delinque y $x_i = 0$ en caso contrario. Se denotará por $\mathbf{x} = \{x_1, \dots, x_n\}$ una asignación de estas variables binarias para toda la red. En analogía con Ballester et al. [8], la ganancia esperada para el individuo i , si éste delinque, está dada por la expresión

$$u_i(\mathbf{x}, g) = y_i(\mathbf{x}) - p_i(\mathbf{x}, g)f, \quad (1)$$

donde

$$y_i(x) = x_i \max \left\{ 1 - \delta \sum_{j=1}^n x_j, 0 \right\}, \quad (2)$$

corresponde a la ganancia bruta del individuo i , que depende de si éste delinque o no, y del perfil delincencial de la población. Por otra parte,

$$p_i(\mathbf{x}, g) = p_0 x_i \text{ máx} \left\{ 1 - \phi \sum_{j=1}^n g_{ij} x_j, 0 \right\}, \quad (3)$$

se refiere a la “perdida” debido a la posibilidad de que el individuo i sea capturado. Dicha ganancia o utilidad depende no sólo de la estrategia adoptada por el individuo en consideración, sino también del esfuerzo de todos los demás individuos y de la estructura de la red. Esto se debe a la competencia global por recursos limitados y a la colaboración local entre individuos. Aquí p_0 está relacionado con probabilidad de que un individuo genérico sea capturado, $\delta > 0$ se relaciona con la intensidad de la competencia global, y $\phi \geq 0$ modela la intensidad de la colaboración y complementariedad local entre los individuos para evitar la aprehensión. Al producto $p_0 f$ lo llamaremos π_0 , correspondiendo al parámetro que modela la intensidad de las sanciones impuestas.

3. Equilibrio de Nash y satisfacción de restricciones

De acuerdo a la hipótesis de racionalidad de la teoría de juegos, los individuos escogen la estrategia x_i (delinquir o no) que maximice su utilidad $u_i(x)$, dados las estrategias escogidas por los demás individuos $\mathbf{x}_{-i} = \{x_1, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_n\}$. Así pues, todos los individuos estarán satisfechos en la configuración $\mathbf{x}^* = \{x^1, \dots, x^n\}$ si

$$u_i(x_i^*, x_{-i}^*) = \text{máx}_{x_i} u_i(x_i, x_{-i}^*) \quad (4)$$

En este caso, dicha configuración se conoce como un equilibrio de Nash puro. El cualitativo de “puro” se refiere a que se están considerando las estrategias delinquir o no, en contraste con estrategias “mixtas” que consisten en delinquir o no con una cierta probabilidad. Si bien está garantizado que un equilibrio de Nash mixto siempre existe, no se puede decir lo mismo de un equilibrio de Nash puro. Por otra parte, los equilibrios de Nash no son necesariamente únicos. Por esta razón una de las cantidades a estudiar será el número de equilibrios de Nash puros como función de los parámetros del modelo.

Una configuración \mathbf{x}^* es un equilibrio de Nash si se satisfacen las n restricciones dadas por la expresión [4]. Este tipo de sistemas se conocen como problemas de satisfacción de restricciones y son de gran relevancia práctica. Introduciendo la función indicador $\mathbb{1}[p]$, la cual es igual a 1 si la proposición p es verdadera e igual a 0 de otro modo, la condición de Nash se puede escribir como:

$$\prod_{i=1}^n \mathbb{1} \left[u_i(x_i^*, x_{-i}^*) = \max_{x_i} u_i(x_i, x_{-i}^*) \right] = 1 \quad (5)$$

Propiedades típicas del sistema pueden calcularse a partir de la probabilidad de que una configuración escogida al azar sea un equilibrio de Nash

$$P(x) = \frac{1}{Z} \prod_{i=1}^n \mathbb{1} \left[u_i(x_i, x_{-i}) = \max_{x_i^*} u_i(x_i^*, x_{-i}) \right], \quad (6)$$

donde la constante de normalización

$$Z = \sum_x \prod_{i=1}^n \mathbb{1} \left[u_i(x_i, x_{-i}) = \max_{x_i^*} u_i(x_i^*, x_{-i}) \right], \quad (7)$$

coincide con el número de equilibrios de Nash en el sistema.

4. Construcción de un sistema físico equivalente

Esta formulación guarda una estrecha relación con la mecánica estadística, y esta simple observación ha abierto toda un área de investigación sobre la aplicación de los métodos matemáticos y computacionales de ésta a un gran número de aplicaciones en diversas disciplinas [15, 19]. Esto ha motivado la formalización matemática de algunos potentes métodos heurísticos desarrollados en el estudio de la mecánica estadística, tales como el celebrado método de la cavidad [11–17]. Por esta razón vale la pena tener una idea más clara de dicha conexión con la mecánica estadística. En particular, la aplicación del método de la cavidad a la búsqueda de equilibrios de Nash en juegos sobre redes fue explorada por uno de los autores [20], y es el método que ha sido empleado en esta investigación.

La idea es simple: a cada configuración se le asocia una función de energía apropiada de manera que las configuraciones de interés, en

este caso los equilibrios de Nash, correspondan a las configuraciones de mínima energía [10, 20]. Así pues dicha función de energía puede definirse en este caso como

$$E(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n E_i(x_i, x_{-i}), \quad (8)$$

donde

$$E_i(x_i, x_{-i}) = \max_{x_i^*} u_i(x_i^*, x_{-i}) - u_i(x_i, x_{-i}) \geq 0 \quad (9)$$

en consecuencia, $E(\mathbf{x}) = 0$ si y sólo si x es un equilibrio de Nash, y éste corresponde al valor mínimo.

Una vez que el espacio de configuraciones y la función de energía son fijados, la probabilidad $P_\beta(\mathbf{x})$ para que el sistema se encuentre en la configuración \mathbf{x} está dada por la distribución de Boltzmann [15]

$$P_\beta(\mathbf{x}) = \frac{1}{Z_B(\beta)} e^{-\beta E(\mathbf{x})} \quad (10)$$

donde β es un parámetro que en aplicaciones a la física corresponde al inverso de la temperatura, excepto por una constante, y la constante de normalización

$$Z_B(\beta) = \sum_{\mathbf{x}} e^{-\beta E(\mathbf{x})} \quad (11)$$

se conoce como función de partición. Las propiedades estadísticas del sistema se pueden estudiar mediante el estudio de dicha función de partición [15], la cual juega un rol de función generante [20].

Finalmente, si se nota que en el límite $\beta \rightarrow \infty$ se tiene

$$e^{-\beta E(\mathbf{x})} = \begin{cases} 0, & \text{si } E > 0, \\ 1, & \text{si } E = 0 \end{cases} \quad (12)$$

y que la condición $E(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n E_i(x_i, x_{-i}) = 0$ corresponde a la condición de Nash, se puede concluir que

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} e^{-\beta E(\mathbf{x})} = \prod_{i=1}^n \mathbb{1} \left[u_i(x_i, x_{-i}) = \max_{x_i^*} u_i(x_i^*, x_{-i}) \right], \quad (13)$$

y que la constante de normalización $\lim_{\beta \rightarrow \infty} Z_B(\beta) = Z$ coincide con el número de equilibrios de Nash (7).

Si bien esto puede parecer una trivialidad, y el parámetro β absolutamente innecesario, esta analogía entre la mecánica estadística y los problemas matemáticos de origen combinatorio ha dado lugar al algoritmo de recocido simulado, uno de los más utilizados desde su inyección [19]. En éste el parámetro β juega un rol fundamental. En la última década otro método inspirado en la mecánica estadística que ha dado lugar a algoritmos más potentes que el de recocido simulado [10] y que ha atraído gran interés por parte de los matemáticos [11–14] es precisamente el método de la cavidad que se discutirá a continuación [15–17, 21, 22].

5. Método de la cavidad para redes delincuenciales

El problema de caracterizar los equilibrios de Nash del sistema está estrechamente relacionado con el cálculo de la función de partición Z . Uno de los métodos más efectivos para tratar con este tipo de problemas es el llamado método de la cavidad. Este método se puede interpretar como un algoritmo de paso de mensajes, donde cada nodo en la red recoge información de sus nodos vecinos, realiza un cálculo con ésta, y reenvía la información actualizada de nuevo a cada uno sus vecinos [15, 23]. De una manera más general, el problema consiste en calcular una suma de la forma

$$Z = \sum_{\mathbf{x}} \Psi(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{x}} \prod_{a=1}^M \Psi_a(\mathbf{x}_a), \quad (14)$$

donde la función que se está sumando se puede escribir como un producto de M factores $\Psi(\mathbf{x}) = \prod_{a=1}^M \Psi_a(\mathbf{x}_a)$, donde cada factor Ψ_a sólo depende de un subconjunto de variables denotado como \mathbf{x}_a . En el caso de las redes delincuenciales aquí estudiadas, hay un factor Ψ_i por cada variable i y está dado por la función indicador que verifica la condición de Nash para el individuo i , y la función Ψ es el producto de los n factores, como puede observarse en la ecuación (7). El método de la cavidad explota la estructura de dicha factorización. Más específicamente, la función Ψ se puede representar como un grafo bipartito donde a cada factor Ψ_a se le asocia un tipo de nodo (representados, por ejemplo, por cuadrados) y a cada variable x_i se le asocia otro tipo de nodo (representados, por ejemplo, por círculos). En este grafo bipartito un vínculo entre

factor Ψ_a y una variable x_i indica que este factor depende de dicha variable. No existen vínculos ni entre factores ni entre variables, lo que le da su carácter de bipartito (ver Figura 1). Dicho grafo usualmente se denomina grafo de factores [23].

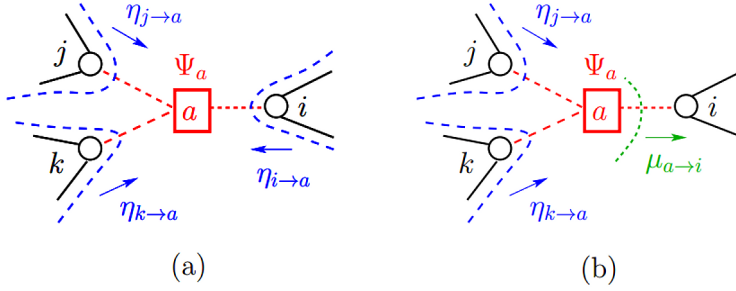


FIGURA 1. Operaciones básicas que permiten definir el método de la cavidad sobre grafos con topología de árbol. a) Si se retira un factor el grafo se descompone en tres sub-grafos completamente independientes. b) Cada sub-grafo hereda la topología de árbol y por lo tanto se puede aplicar recursivamente la misma idea.

Ahora bien, el método de la cavidad parte de la hipótesis de que el grafo de factores tiene la topología de un árbol, es decir que no existen ciclos, o mejor que no es posible partir de algún nodo en el grafo, caminar por éste a través de los vínculos, y llegar de nuevo al punto de partida sin nunca haber repetido un vínculo. En la Figura 1 notamos que si se retira un nodo factor del grafo y los vínculos correspondientes, éste se descompone en tres subgrafos completamente independientes y nuevamente con la topología de un árbol. Esta propiedad de independencia se debe precisamente a la topología de árbol del grafo original, y como puede verse los sub-grafos obtenidos heredan dicha estructura. Esto permite aplicar la misma idea de manera recursiva para obtener una solución del problema de manera eficiente, a partir de las soluciones de las siguientes ecuaciones [15, 23, 24] (ver Figura 1)

$$\mu_{a \rightarrow i}(x_i) = \frac{i}{\zeta_{a \rightarrow i}} \sum_{x_{a \setminus i}} \Psi_a(\mathbf{x}_a) \prod_{j \in a \setminus i} \eta_{i \rightarrow a}, \quad (15)$$

$$\eta_{i \rightarrow a}(x_i) = \frac{i}{\zeta_{i \rightarrow a}} \prod_{b \in \partial i} \mu_{b \rightarrow i}(x_i), \quad (16)$$

donde $\mu_{a \rightarrow i}$ pasa información parcial de la rama que contiene el factor a pero no contiene el nodo i , normalizada de manera que $\sum_{x_i} \mu_{a \rightarrow i}(x_i) = 1$. Así mismo $\eta_{i \rightarrow a}$ pasa información parcial de la rama que contiene el nodo i pero no contiene el factor a , normalizada de manera que $\sum_{x_i} \eta_{i \rightarrow a}(x_i) = 1$. Las constantes $\zeta_{a \rightarrow i}$ y $\zeta_{i \rightarrow a}$ se escogen de manera que garanticen la normalización de los mensajes $\mu_{a \rightarrow i}$ y $\eta_{i \rightarrow a}$ para todo vínculo (i, a) .

Una vez se solucionan estas ecuaciones se pueden obtener los marginales asociados a una variable o a un factor así:

$$p_i(x_i) = \frac{1}{\zeta_i} \prod_{b \in \partial i} \mu_{b \rightarrow i}(x_i), \quad (17)$$

$$P_a(\mathbf{x}_a) = \frac{1}{\zeta_a} \Psi_a(\mathbf{x}_a) \prod_{j \in \partial a} \eta_{j \rightarrow a}(x_j), \quad (18)$$

donde las constantes ζ_i y ζ_a garantizan la correcta normalización de dichas distribuciones de probabilidad. Este resultado puede asimilarse de manera intuitiva observando que los marginales simplemente recogen toda la información que llega al nodo en consideración, con el detalle adicional que en el caso de un nodo factor a se debe adicionar el factor mismo Ψ_a ya que éste no ha sido tenido en cuenta por los mensajes que llegan a dicho factor.

A partir de estos marginales se pueden calcular cantidades de interés como el número promedio de individuos que delinquen y la entropía

$$\langle x \rangle = \sum_i \sum_{x_i} x_i p_i(x_i), \quad (19)$$

$$\begin{aligned} S &= - \sum_x P(x) \log P(x) \\ &= - \sum_x \sum_{x_a} P_a(x_a) \log P_a(x_a) + \sum_i (d_i - 1) \sum_{x_i} \sum_{x_a} P_i(x_i) \log P_i(x_i) \end{aligned} \quad (20)$$

El conjunto de ecuaciones 15 y 16 puede resolverse inicializando los mensajes con valores positivos al azar y luego iterando dichas ecuaciones hasta converger a un punto fijo. En el caso de que el grafo de factores tenga la topología de un árbol, este método converge a un único punto fijo en un número de iteraciones dado por el diámetro del árbol, es decir la mayor distancia, o número de vínculos, que existe entre cualquier par de nodos en el grafo [15].

Aunque el método de la cavidad se define con referencia a un árbol, parte del gran interés que ha despertado se debe a que su aplicación a grafos más generales con ciclos funciona sorprendentemente bien. La intuición detrás del éxito del método de la cavidad es que si los ciclos en un grafo dado son lo suficientemente largos y si las correlaciones entre pares de variables en éste decaen lo suficientemente rápido con la distancia, o número de vínculos entre las variables, entonces las ecuaciones de la cavidad ‘ven’ efectivamente un árbol. En otras palabras, en la práctica los mensajes ‘convergen’, en un sentido aproximado, en un número de iteraciones relativamente corto y la variabilidad en éstos después de dicho punto puede ignorarse. Así pues, el método de la cavidad tal y como se ha presentado puede aplicarse también a grafos con ciclos, si bien en este caso ya no habrá garantías de convergencia ni de precisión en los resultados. En este sentido debe entenderse como un método heurístico que en la práctica usualmente funciona bastante bien. Antes de poder aplicar el método de la cavidad al problema de redes delincuenciales se debe tener en cuenta un par de detalles adicionales que se describirán a continuación.

Por una parte, en la Figura 2a se muestra el grafo de factores que corresponde al problema de satisfacción de restricciones asociado a la condición de equilibrio de Nash para una red delincencial con la topología de un árbol. Como se puede observar dicho grafo de factores no hereda la misma topología de árbol debido a la existencia de ciclos pequeños de cuatro vínculos que unen cualquier par de variables. Este problema se puede resolver si se agrupan pares de variables de nodos vecinos en nuevas variables, como se muestra en la Figura 2b. En este caso la topología del grafo de factores equivalente es la de un árbol, al costo de que ahora los mensajes en consideración dependerán de dos variables, y no de una como era el caso descrito en la sección anterior [20].

Por otra parte, como se puede observar en la Figura 2 la función de utilidad de cada individuo depende de las estrategias de todos los individuos en la red a través de la suma $\sum_{i=1}^n x_i$. Esto implica que cada factor en el grafo de factores asociado dependerá a su vez de todas las variables del problema. Por lo tanto, incluso si se considera una red delincencial con la topología de un árbol y se agrupan las

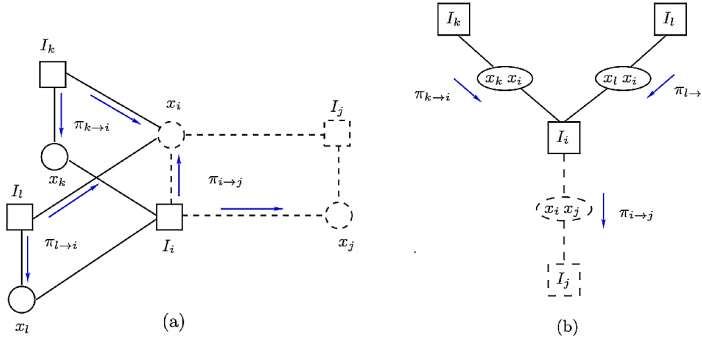


FIGURA 2. Grafo de factores asociado a un juego sobre redes, como lo es el modelo de redes delincuenciales aquí estudiado. a) A cada individuo se asocia una variable (círculo) que corresponde a su estrategia, y un factor (cuadrado) que verifica que se cumpla la condición de Nash respectiva; se puede notar que aunque la red delincencial tenga la topología de un árbol, el grafo de factores asociado al problema de restricciones que da lugar al equilibrio de Nash no lo es, pues tiene ciclos cortos de cuatro vínculos entre nodos vecinos. b) Si bien el grafo original no tiene la topología de un árbol, agrupando las variables por pares se puede construir un grafo equivalente con la topología de árbol sobre el cual el método de la cavidad es exacto. En este caso los mensajes dependerán de las dos variables agrupadas, y no de una sola, por lo que se han denotado como $\pi_{i \rightarrow j}$ [20].

variables por pares como se describió anteriormente, el grafo de factores asociado no heredará aún la topología de árbol de la red delincencial. Sin embargo, esto se puede resolver de una manera aproximada aprovechando el hecho de que dicha dependencia no es arbitraria sino que cada factor depende de todas las variables a través de una cantidad agregada, es decir la suma de todas las variables. En este caso se puede asumir que se conoce el valor de dicha suma $c = \sum_{i=1}^n x_i$. Condicionado al valor de dicha suma el grafo de factores hereda la topología de árbol [25]. La aproximación aparece en el modo de escoger c . El modo más elemental de hacerlo es reemplazando en (2)

$$\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n x_j \approx \frac{x_i + \sum_{j \in \partial_i} x_j}{|\partial_i| + 1} \quad (21)$$

Otra posibilidad sería escoger de manera auto-consistente el valor de c por su promedio $\langle x \rangle$ calculado con los mensajes en cada

iteración. Este último método, implementado originalmente en [20], no arrojó resultados aceptables en este caso y por eso esta investigación se concentró en el método descrito por la ecuación (21), dejando para futuros estudios la exploración de otros métodos más precisos.

6. Resultados

En esta sección se presentan los resultados obtenidos mediante la solución iterativa de las ecuaciones de la cavidad para redes delincuenciales, descritas anteriormente, con el fin de caracterizar las propiedades de los equilibrios de Nash puros en éstas. El estudio se concentró en dos propiedades de interés, a saber: el número promedio de individuos que delinquen en la red (19), o criminalidad promedio, y la entropía de equilibrios de Nash puros (20) que corresponde al logaritmo del número de éstos. En particular, se estudió cómo varían dichas propiedades con los parámetros del modelo.

Si bien hay evidencias de que las redes oscuras, como las redes delincuenciales tienen la topología de una red libre de escala [18], con el objeto de facilitar este primer análisis se asumió que la topología de las redes delincuenciales en consideración es la de un grafo aleatorio o Erdős-Rényi. Este tipo de grafos se genera primero seleccionando un conjunto de N nodos y luego uniendo pares de nodos al azar hasta completar M vínculos. La conectividad promedio de estos grafos, es decir el número de vínculos que en promedio tiene un nodo escogido al azar es simplemente $C = 2M/N$. Así pues, se generaron grafos con N nodos y M vínculos y se resolvieron las ecuaciones de la cavidad correspondientes con el fin de estimar el nivel de criminalidad promedio (19) y el logaritmo del número de equilibrios de Nash (20), o entropía, para diversos valores de los parámetros. En todos los casos se escogió $N = 100$ y $M = 250$, y por lo tanto $C = 5$.

En general se observó que los resultados muestran una gran granularidad, probablemente debido a la presencia de las funciones máximo en la función de utilidad y al carácter discreto de las variables involucradas. Este es un punto importante que se debe estudiar en futuras investigaciones.

Las Figuras 3(a) y 3(b) muestran los resultados obtenidos con $\pi_0 = 0.5$ y $\phi = 0.5$ y el parámetro δ variando en $[0.5, 3.5]$. Análogamente, las Figuras 3(c) y 3(d) corresponden a $\delta = 3.8$ y $\phi = 0.3$, y con π_0 variando en $[0.1, 0.9]$. Por último, las Figuras 3(e) y 3(f) se obtuvieron con $\delta = 1.7$ y $\pi_0 = 0.5$, con ϕ variando en $[0.15, 1]$. Note que en todas estas figuras se reportan cantidades normalizadas por el número de individuos en la red, es decir $\langle x \rangle/N$ y S/N .

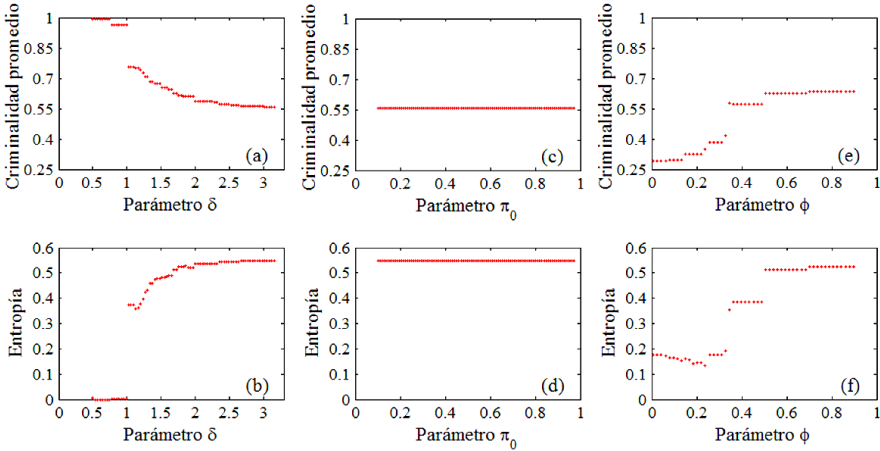


FIGURA 3. *Criminalidad Promedio y Entropía vs parámetros δ , π_0 y ϕ .*

En la Figura 3(a) se puede observar que la criminalidad promedio es alta para valores pequeños de δ , manteniéndose casi constante para valores entre 0.5 y 1. Para $\delta = 1$ la criminalidad promedio disminuye considerablemente y a partir de allí manifiesta una leve disminución hasta estabilizarse en aproximadamente 0.55 cuando $\delta \geq 3$. Dado que el parámetro δ mide el nivel de competencia por los recursos limitados, se puede considerar que esta disminución de la criminalidad promedio con el aumento de δ es un indicador de que las ganancias disminuyen en la medida en que más individuos delinquen, tal y como se espera de la definición del modelo.

La Figura 3(b) muestra que la entropía se mantiene igual a cero para valores de delta entre 0.5 y 1, lo cual indica un número sub-exponencial de equilibrios de Nash. Cuando $\delta = 1$ la entropía manifiesta un crecimiento abrupto y a partir de allí manifiesta un crecimiento lento hasta alcanzar un valor de 0.6 cuando δ

se aproxima a 3.5. Un valor positivo equivale a un número de equilibrios de Nash que crece exponencialmente con el número de individuos en la red.

Con respecto a una entropía positiva podrían ocurrir dos situaciones: En primer lugar, al existir tantos equilibrios de Nash puede resultar relativamente fácil para los individuos en la red encontrar uno y en ese sentido la actividad criminal en la red podría interpretarse como el resultado de un comportamiento “racional.”^{en} el sentido de la teoría de juegos. Por otra parte, al tener tantos caminos conducentes a equilibrios de Nash podrían confundirse y no encontrar ninguno, dado que se requeriría un esfuerzo de coordinación adicional para converger a un equilibrio específico de los tantos disponibles. Un mejor entendimiento requeriría de la introducción de dinámicas de aprendizaje [26] y / o de nociones más refinadas de equilibrio, lo cual se deja para estudios posteriores.

Con respecto al parámetro π_0 es importante anotar que los cambios observados son minúsculos, por lo que podría considerarse que no hay variaciones con éste. La Figura 3(c) muestra que la criminalidad promedio experimenta una leve disminución, casi que escalonada, en la medida que π_0 aumenta tornándose constante cuando π_0 alcanza un valor próximo a 0.66. Esto deja ver que aumentando la intensidad de la sanción aplicada, representada por π_0 , puede en principio disminuirse la criminalidad promedio pero dicha disminución es prácticamente imperceptible. Así mismo, en la Figura 3(d) puede verse que el comportamiento de la entropía es similar al de la criminalidad promedio puesto que también disminuye cuando π_0 aumenta y también logra estabilizarse cuando π_0 alcanza un valor próximo a 0.4. Esto indica que aumentando la sanción promedio se entorpece, aunque mínimamente, la consecución de equilibrios de Nash, y entonces la red criminal se ve afectada en forma negativa.

Por otra parte, la Figura 3(e) indica que la criminalidad promedio crece en forma escalonada en la medida que ϕ también aumenta variando entre 0.3 y 0.65, aproximadamente. Los cambios en la criminalidad promedio se dan de forma notoria cuando ϕ pasa de 0.34 a 0.35 y un poco menos cuando ϕ pasa de 0.5 a 0.51.

Estos resultados sugieren que los valores de ϕ deben mantenerse bajos porque este parámetro indirectamente regula la sanción que un delincuente particular pueda recibir. En otras palabras, entre más grande sea ϕ menor tiende a ser la probabilidad de que un delincuente en particular sea capturado. Este parámetro podría forzarse a tomar valores suficientemente bajos tratando de intervenir la intensidad de las interacciones de un individuo con sus compañeros directos, lo que podría quizá lograrse mediante campañas publicitarias o educativas.

Por último, en la Figura 3(f) se observa que la entropía aumenta con el parámetro ϕ también aumenta tomando valores entre 0.1 y 0.55, aproximadamente. Este aumento escalonado de la entropía se da de forma notoria cuando ϕ pasa de 0.34 a 0.35 y un poco menos cuando ϕ pasa de 0.5 a 0.51. También se puede notar una pequeña disminución en los valores de la entropía cuando ϕ asume valores próximos a 0.2.

7. Conclusiones

En este trabajo se definió un modelo de redes delincuenciales basado en la teoría de juegos [27] y se exploraron algunas propiedades estadísticas de sus equilibrios de Nash. Se mostró como se puede formular el problema de encontrar equilibrios de Nash como un problema de satisfacción de restricciones y cómo se puede mapear formalmente dicho problema a un sistema físico ficticio equivalente, con el fin de explotar los métodos matemáticos y computacionales de la mecánica estadística para su estudio. Se presentó también introducción a este tema, cuya formalización matemática rigurosa es un área muy activa de investigación en la actualidad. Uno de los métodos principales aquí estudiados fue el método de la cavidad el cual da lugar a un algoritmo de paso de mensajes que permite resolver el problema en consideración de manera eficiente, aunque aproximada.

A partir de estas técnicas se exploró el modelo de redes delincuenciales aquí propuesto en función de sus parámetros. Más específicamente, se generaron computacionalmente redes con la topología de grafos aleatorios o de Erdős-Rényi. Se estudió la

variación de la criminalidad promedio y del número de equilibrios de Nash, o mejor de su logaritmo o entropía, en función de tres parámetros que definen el modelo. Estos parámetros se relacionan, respectivamente, con la intensidad de competencia global (δ), la colaboración local entre individuos en la red (ϕ), y la intensidad de las sanciones impuestas (π_0). Se observó que la variación con π_0 , dentro del rango estudiado, es prácticamente irrelevante, mientras que la variación con δ y ϕ es mucho más notoria. Los resultados de esta investigación sugieren que para atacar este tipo de redes delincuenciales puede ser más efectivo utilizar estrategias que busquen modificar la intensidad de interacción de los individuos en la red, en vez de aumentar la intensidad de las sanciones impuestas. Descubrimos que mantener bajos los valores de la intensidad de competencia global (δ) implica una disminución de la criminalidad promedio y un número bajo de equilibrios de Nash, luego, una estrategia que permita que la ganancia bruta de cada individuo se vea disminuida ayudará a debilitar a estas redes delincuenciales. Esta puede ser haciendo menos rentable la actividad delincriminal.

Referencias

- [1] D. Lazer, A. Pentland, L. Adamic, S. Aral, A.-L. Barabási, D. Brewer, N. Christakis, N. Contractor, J. Fowler, M. Gutmann, T. Jebara, G. King, M. Macy, D. Roy, and M. Van Alstyne, *Science* **323**, 721 (2009).
- [2] V. Backaitis, “Data is the new oil,” (CMS Wire, 2012).
- [3] M. O. Jackson and Y. Zenou, *Games on Networks*, Tech. Rep. (Department of Economics, Stanford University, 2014).
- [4] D. Helbing and A. F. Carbone, *Eur. Phys. J. Special Topics (Special Issue)* **214**, 1 (2012).
- [5] J. Giles, *Nature News* **488**, 448 (2012).
- [6] P. Rotella, “Is data the new oil?” (Forbes, 2012).
- [7] Á. F. Tenorio-Villalón and A. M. Martín-Caraballo, *B. Mat.* **22**, 77 (2015).
- [8] C. Ballester, Y. Zenou, and A. Calvó-Armengol, *J. Eur. Econ. Assoc.* **8**, 34 (2010).
- [9] T. A. Sarmiento Bahoque, J. F. Cantillo Palacio, J. E.

- Realpe Gómez, and J. A. Montoya Martínez, *Ing. Cienc.* **12**, 83 (2016).
- [10] M. Mézard, G. Parisi, and R. Zecchina, *Science* **297**, 812 (2002).
- [11] M. Talagrand, *Spin Glasses: A Challenge for Mathematicians - Cavity and Mean Field Models* (Springer Science & Business Media, 2003).
- [12] M. Talagrand, *Mean Field Models for Spin Glasses - Volume I: Basic Examples* (Springer Science & Business Media, 2011).
- [13] F. Guerra and F. L. Toninelli, *Commun. Math. Phys.* **230**, 71 (2002).
- [14] F. Guerra, *Commun. Math. Phys.* **233**, 1 (2003).
- [15] M. Mézard and G. Parisi, *Information, Physics, and Computation* (Oxford University press, 2009).
- [16] M. Mézard and G. Parisi, *Eur. Phys. J B* **20**, 217 (2001).
- [17] M. Mézard and G. Parisi, *J. Stat. Phys.* **111**, 1 (2003).
- [18] J. Xu and H. Chen, *Commun. ACM* **51**, 58 (2008).
- [19] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, and M. P. Vecchi, *Science* **220**, 671 (1983).
- [20] A. Ramezanpour, J. Realpe-Gomez, and R. Zecchina, *Eur. Phys. J B* **81**, 327 (2011).
- [21] H. A. Bethe, *P. Roy. Soc. Lond. A Mat.* **150**, 552 (1935).
- [22] R. Peierls, *P. Roy. Soc. Lond. A Mat.* **154**, 207 (1936).
- [23] F. R. Kschischang, B. J. Frey, and H. A. Loeliger, *IEEE T. Inform. Theory* **47**, 498 (2001).
- [24] F. Altarelli, R. Monasson, G. Semerjian, and F. Zamponi, *CoRR* **abs/0802.1829** (2008).
- [25] J. von Neumann, O. Morgenstern, H. Kuhn, and A. Rubinstein, *Theory of Games and Economic Behavior*, Princeton Classic Editions (Princeton University Press, 2007).
- [26] J. Realpe-Gomez, B. Szczyzny, L. DallAsta, and T. Galla, *J. Stat. Mech.-Theory E.* **2012**, P10022 (2012).
- [27] M. Jackson, *Social and Economic Networks*, Princeton University Press (Princeton University Press, 2010).

INSTRUCCIONES PARA LOS AUTORES

La revista MOMENTO publica semestralmente resultados originales inéditos de investigación básica y aplicada en diversas áreas de la física. El contenido de los artículos no debe haber sido publicado, total o parcialmente, en otra revista. Cada manuscrito será sometido a un proceso de evaluación por pares seleccionados por el Comité Editorial, y según su respuesta se decidirá o no su publicación o se sugerirán posibles modificaciones. El Comité Editorial podrá rechazar, sugerir cambios o llegado el caso, realizar modificaciones al estilo literario sin alterar el contenido científico. Los artículos aceptados para publicación serán revisados en su versión final por cada uno de los autores. El tiempo de evaluación es de al menos un mes. La precisión de la información en los manuscritos, incluyendo figuras, tablas y citas bibliográficas es responsabilidad completa del autor o autores.

MOMENTO publica artículos de investigación científica y tecnológica, de reflexión, de revisión y cortos. Se publican artículos en español e inglés y deben ser enviados preferiblemente en formato L^AT_EX o en Microsoft Word de acuerdo al formato momento.tex disponible en <http://revistas.unal.edu.co/index.php/momento/about/submissions#authorGuidelines>.

Los trabajos para publicar deben incluir la estructura generalmente aceptada para artículos de revistas científicas con los elementos básicos como:

- **Título del artículo.** Debe ir en español e inglés, en mayúsculas, no debe contener fórmulas ni abreviaturas. Debe ser preciso y coherente con el tema desarrollado y no debe exceder 130 caracteres incluyendo los espacios. Los títulos, resúmenes y palabras clave se organizan dependiendo del idioma en el que se escriba el artículo. Entonces, si el artículo se escribe en español se debe colocar primero el título en español y luego en inglés. Si el artículo se escribe en inglés se coloca primero el título en inglés y luego en español. Así mismo para el resumen y palabras clave.
- **Nombre de los autores.** Se debe incluir de cada autor el nombre, inicial del segundo nombre si lo tiene y el primer apellido. Relacionar la filiación de los autores con números superíndices y el correo electrónico del autor al que se le debe dirigir la correspondencia (un solo autor).
- **Resumen en español e inglés** Máximo 250 palabras. Debe contener el objetivo principal, hallazgos más importantes y conclusiones del trabajo. **Palabras Clave y Keywords.** Máximo 5 palabras. Usar tesauros específicos o disciplinares de acuerdo con el contenido del tema del manuscrito y que no se incluyan en el título del trabajo.
- **Desarrollo del artículo** El texto debe dividirse en secciones, cada una con un encabezado. Por ejemplo: Introducción, Parte Experimental y/o Desarrollo Teórico, Resultados y Discusión, Conclusiones. Los títulos se deben alinear a la izquierda y resaltarlos en negrilla. Se recomienda que estas secciones sean breves y equilibradas.
- **Referencias bibliográficas.** Sólo se deben citar aquellas referencias que figuren en la sección de bibliografía y deben ser numeradas en el texto en forma consecutiva (conforme vayan apareciendo) y en paréntesis cuadrados. No se deben citar referencias en el resumen. Las referencias bibliográficas deben seguir el formato de la American Physical Society (se recomienda el uso de BibTEX). Se deben escribir en abreviatura los títulos de las revistas o los títulos completos de no encontrarse en Journal Title

Abbreviations o en <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/nlmcatalog/journals>. En general las citas deben contener: el apellido y las iniciales del nombre de todos los autores separados por coma, seguido del nombre de la revista, el año, el volumen y las páginas. Si la publicación cuenta con DOI, se debe incluir. Para los archivos enviados en Microsoft Word poner después del año, de ser posible, las direcciones web o el link de cada referencia citada (se sugiere usar la herramienta Endnote). El material no publicado se refiere a los trabajos aceptados para publicación pero que no han sido impresos. Algunos ejemplos de citas se muestran a continuación.

- **Artículo:** P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. 136, B864 (1964).

- **Libro:** A. Bard and L. Faulkner, Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications (Wiley, 2000). pp. 1010-1014.

- **Tesis (o similar):** K. Martínez. Producción y Caracterización de Nuevos Materiales (tesis de maestría). Bogotá, Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia; 2015. p. 10-46.

- **Memorias de congreso:** J. D. Pabón and G. Hurtado, in Memorias del Congreso Mundial de Páramos (2002) p. 98.

- **Material no publicado:** T. Poon, Optical Scanning Holography With Matlab (Springer) En prensa. 2017.

- **Página Web:** NASA. Status of the Ozone Hole 2016.

<https://ozoneaq.gsfc.nasa.gov/omps/ozone-hole/>. Consultada el 10 de noviembre de 2016.

Requisitos:

- Las figuras y tablas deberán numerarse en forma consecutiva, y deben contener en la parte inferior un título o leyenda explicativa. Las figuras deben además ser enviadas por separado con buena resolución (300 pixeles por pulgada) en formato jpg, pgn, tif o gif. Al graficar diferentes series de datos usar en lo posible diferentes símbolos (marcadores de datos en Excel, ver ejemplo en los formatos de Latex o Word). Los ejemplares físicos serán impresos en blanco y negro, sin embargo en la página web se encontrarán los artículos con las figuras a color.

- Unidades, abreviaturas y símbolos: Se usará el Sistema internacional de Unidades (m, Kg, s, K), empleando sólo términos aceptados generalmente. Es necesario explicar las abreviaturas desconocidas cuando se usen por primera vez. Se debe poner especial cuidado al escribir los símbolos para que sean identificados claramente con el autor el uso de fórmulas, caracteres especiales u otros.

- Se recomienda reducir el número de notas de pie de página, especialmente las que hacen referencia a otras notas dentro del mismo documento y no utilizarlas para hacer referencias bibliográficas.

- Si se requieren agradecimientos, reconocimientos a entidades, permisos de publicación, etc., irán al terminar el texto y antes de las Referencias bibliográficas.

- Como requisito adicional es necesario llenar los formatos "Declaración originalidad responsabilidad de autoría y conflicto de intereses" y "Formato transferencia derechos de autor" y enviarlos por correo electrónico o adjuntarlos como documentos adicionales en el sistema OJS (ver página web).

- Las contribuciones no deben superar las 15 páginas.

El texto de las contribuciones debe ser enviado por medio de la página web y/o a **momento_fcbog@unal.edu.co**

Revista Momento 54
se terminó de imprimir
y encuadernar en Proceditor
en Bogotá, D. C., Colombia.



