Libro de Resúmenes

Última actualización: 11.10.2021 – 16:20

- Charlas Plenarias (7)
- Charlas de División
    - Física de la Atmósfera, Tierra y Agua (9)
    - Enseñanza de la Física (13)
    - Física Atómica y Molecular (12)
    - Fundamentos e Información Cuántica (16)
    - Física Médica (19)
    - Física Nuclear (8)
    - Fotónica y Óptica (13)
    - Fluidos y Plasma (5)
    - Industria y Tecnología (28)
    - Materia Blanda (10)
    - Materia Condensada (30)
    - Mecánica Estadística, Física no Lineal y Sistemas Complejos (24)
    - Partículas y Campos (11)
- Subcomisión de Género (1)
- Charlas COVID-19 (6)
- Premio Giambiagi (2)
- Sesión de Pósters 1 (70)
    - Enseñanza de la Física; Física de la Atmósfera, Tierra y Agua; Industria y Tecnología; Física Médica; Partículas y Campos; Astrofísica; Física Matemática
- Sesión de Pósters 2 (80)
    - Materia Condensada
- Sesión de Pósters 3 (83)
    - Física Atómica y Molecular; Fundamentos e Información Cuántica; Óptica y Fotofísica
- Sesión de Pósters 4 (44)
    - Biofísica y Modelado de Sistemas Biológicos; Materia Blanda; Mecánica Estadística, Física no Lineal y Sistemas Complejos; Fluidos y Plasma

Descripción mecánico-cuántica de la radiación de la materia biológica con haces de iones

• Roberto D. Rivarola,[1] M. A. Quinto,[1] J. M. Monti,[1] C. A. Tachino,[1] O. A. Fojón,[1] P. N. Terekhin,[2] P. F. Weck,[3] M. E. Alcócer-Ávila,[4] C. Champion[4]

[1] *Instituto de Física de Rosario, CONICET-UNR*
[2] *Technische Universität Kaiserslautern, Alemania*
[3] *Sandia National Laboratories, Albuquerque, EEUU*
[4] *CELIA, Université de Bordeaux, France*

La comprensión de los mecanismos físicos que producen deposición de energía sobre la materia biológica resulta de interés principal en radioterapia, en particular en hadronterapia. La modelización de los daños radiobiológicos inducidos por las partículas ionizantes que atraviesan la materia viva requiere de un conocimiento preciso de la historia completa de la radiación. Reacciones electrónicas diferentes, como ionización electrónica, intercambio de carga y excitación, son candidatos principales para dar una descripción adecuada del proceso. Usando modelos mecánico-cuánticos, se investigan las reacciones de los blancos moleculares impactados con velocidades de colisión suficientemente altas. Entre ellos, debemos mencionar el agua, las cuatro nucleobases (adenina, citosina, timina y guanina) y el esqueleto azúcar-fosfato del ADN, como así también el uracilo del ARN. Las secciones eficaces diferenciales múltiples, simples y totales de emisión electrónica describen adecuadamente los resultados experimentales recientes. La mediciones para captura electrónica son más escasas y es posible contrastar solamente unos pocos valores de secciones eficaces con las predicciones teóricas. Se evalúa también el rol de la emisión Auger en las reacciones de ionización y captura electrónicas. Con el objeto de obtener una mejor representación de la cartografía del depósito energético inducido por el impacto de iones sobre el medio biológico, se compara el depósito medio de energía en agua con el de un homólogo de ADN "realista". A tal efecto, se considera un blanco biológico compuesto por ADN hidratado, simulado con la incorporación de 18 moléculas de agua por nucleótido y se contrastan los resultados con el caso de ADN "seco" [1]. Una descripción detallada de transferencia de energía inducida por impacto de protones, para las reacciones de ionización y captura electrónicas, pone en evidencia discrepancias importantes entre agua y ADN, revelando también el rol crucial que juega el esqueleto azúcar-fosfato. Los resultados son incorporados en un código Monte Carlo [2,3] de transporte de partículas, para determinar los patrones de depósito de energía a escala nanométrica en el núcleo celular.

Referencias:

[1] C. Champion *et al.*, Phys. Med. Biol. **60**, 7805 (2015).
[2] M.A. Quinto *et al.*, Eur. Phys. J. D **71**, 130 (2017).
[3] M.E. Alcócer-Ávila *et al.*, Sci. Rep. Nat. Res. **9**, 14030 (2019).

Geometría y topología en dinámica de fluidos

• Pablo Mininni[1]

[1] *Departamento de Física, FCEN, UBA IFIBA, CONICET*

La turbulencia es un ejemplo ubicuo en la naturaleza de la física de sistemas extensos fuera del equilibrio. Se observa en la atmósfera y los océanos, en el medio interplanetario, y hasta en superfluidos y condensandos de Bose-Einstein. En la mayoría de estos sistemas puede interpretarse como una forma eficiente y desordenada de disipar la potencia inyectada en el sistema, y tradicionalmente está caracterizada por una ecuación de balance y por el desarrollo de un flujo invariante de escala. Sin embargo, existen excepciones a esta regla: a veces la turbulencia resulta en sistemas mas ordenados, o en la autoorganización del flujo en estructuras coherentes. Entender su dinámica tiene un impacto práctico, pero también en el estudio de procesos básicos en mecánica estadística y materia condensada blanda. En esta charla presentaré una revisión de diversos resultados teóricos, experimentales y numéricos obtenidos en nuestro grupo en los últimos años, con especial énfasis en cómo estudiar estos fenómenos desde un punto de vista geométrico (local) y topológico (global). Desde la caída de gotas de lluvia o el desarrollo de eventos extremos en la atmósfera, hasta la formación de nudos en condensados de Bose-Einstein, muchos fenómenos pueden ser interpretados o reducidos exitosamente a sistemas con pocos grados de libertad combinando ambas descripciones.

Posibles Implicaciones observables de quantum gravity en cosmologia y física fundamental

• Alejandro Perez[1]

[1] *Centre de Physique Theorique, Aix-Marseille University, France*

Varios enfoques de la gravedad cuántica predicen que la física es fundamentalmente discreta a escala de Planck. La hipótesis de una forma de discretitud fundamental podría ser la clave para resolver ciertas cuestiones abiertas desde hace tiempo en la física de los agujeros negros (problema de la información de los agujeros negros). Argumentaremos además que esta perspectiva teórica abre la puerta a una rica fenomenología con consecuencias potencialmente observables en cosmología que van desde modelos de formación de estructuras (inhomogeneidades en el CMB), hasta posibles explicaciones del origen de la energía oscura y la materia oscura.

Manipulation of nuclear spins via NMR - Some examples of application

• Tito Bonagamba[1]

[1] *Group of Magnetic Resonance, Spectroscopy and Magnetism, Universidade de São Paulo*

Over the past 70 years, Nuclear Magnetic Resonance (NMR) has undergone an extraordinary process of improvement in the field of Physics, with advanced applications in several areas of knowledge. Today, NMR is widely employed in the development of basic and applied research, both within and outside Academia. Outside Academia, NMR revolutionized the field of medical diagnosis with Magnetic Resonance Imaging (MRI) and the analysis of industrial products. Its applications range from fundamental studies, such as Quantum Information, to its use in Oil Industry for Well Logging. This lecture will present the efforts made to keep this important experimental methodology alive in an Academic Research Institution in the field of Physics, in all its aspects, including instrumentation, development of methods and their applications, with an emphasis on Petroleum Science. Research activities carried out in collaboration with scientists working in the Industry will also be presented.

Fenómenos emergentes en superficies e interfaces de materiales cuánticos

• Laura Steren[1]

[1] *INN, Centro Atómico Bariloche - CONICET - Comisión Nacional de Energía Atómica*

Los materiales cuánticos se definen como plataformas versátiles para explorar fenómenos cuánticos emergentes y evaluar su potencial empleo en tecnologías disruptivas. Los óxidos complejos, incluidos en esta categoría, aparecen como candidatos ideales para explorar efectos novedosos y aplicarlos a dispositivos multifuncionales. La ruptura de simetrías en interfaces y superficies en estos materiales provoca reconstrucciones que afectan fuertemente sus propiedades físicas, dando lugar a características diferenciadas respecto a las de los materiales masivos y produciendo, en muchas ocasiones, fenómenos inesperados. En este sentido, se han reportado, por ejemplo, gases de electrones bidimensionales sobre superficies o interfaces de materiales aislantes, exchange bias en interfaces ferromagneto-metal normal y, más recientemente, texturas de espín quirales. En esta charla presentare resultados recientes sobre el magnetismo y la electrónica de interfaces a base de óxidos, discutiré particularmente fenómenos emergentes causados por la interacción espín-orbita y efectos topológicos además de introducir los dispositivos conformados por heteroestructuras a base de óxidos que se encuentran hoy en etapa de desarrollo.

Playing Lego with 2D materials

• Petra Rudolf[1]

[1] *Zernike Institute for Advanced Materials, University of Groningen, The Netherlands*

Even since the Mayans first used clays to make dyes, mankind has studied and made use of layered materials. Currently we live in an era of enormous interest in the manipulation of two-dimensional materials following the discovery of the marvelous properties of graphene. In this talk I shall illustrate various aspects of production of 2D solids and discuss their properties. Then I shall pass on to pillared structures achieved by intercalation of molecules between the 2D layers and stacked bilayer structures. Fascinating fundamental discoveries concerning the electronic states in single and stacked layers will be discussed as well as the use of pillared materials for gas storage, catalytic and biomedical applications.

Fronteras de la Estructura Nuclear

• Augusto Macchiavelli[1]

[1] *Nuclear Science Division, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley CA 94720*

El núcleo atómico constituye un sistema único de fermiones que interactúan fuertemente. Sus propiedades y estructura son de suma importancia en varias áreas de la ciencia contemporánea, y fenómenos físicos encontrados en los núcleos comparten con otros sistemas de muchos cuerpos los mismos ingredientes básicos.
Específicamente, la estructura de los núcleos alejados del valle de estabilidad es una de las fronteras de investigación en Física Nuclear. El desarrollo de aceleradores de haces exóticos y de nuevos sistemas de detección, proveen las herramientas necesarias para estudiar esta frontera.
Un aspecto de mucho interés es entender el papel que juegan las diferentes componentes de la fuerza nuclear en la evolución de la estructura de capas y de las correlaciones con isospín y los efectos debidos a la presencia del continuo debido en sistemas poco ligados.
En esta charla, presentaré resultados recientes en estos temas y discutiré oportunidades para nuevos estudios.

*Trabajo subvencionado por el US-DOE por contrato DE-AC02-05CH11231.

Análisis de estabilidad de la asociación entre foF2 y distintos índices de actividad solar

• Gloria Tan Jun Rios,[1] Gustavo M. Meneses Ancalle,[1] Atuel E. Villegas Andina,[1] Matias Cornet,[1] Blas F. de Haro Barbas,[2,3,4] Valentin Venchiarutti,[3,4] Ana G. Elias[2,3,4]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología - Universidad Nacional de Tucumán*
[2] *Instituto de Física del Noroeste Argentino, CONICET-UNT*
[3] *Laboratorio de Ionosfera, Atmosfera Neutra y Magnetosfera - LIANM, FACET, UNT*
[4] *Dpto. Física, Fac. Ciencias Exactas y Tecnología, Universidad Nacional de Tucumán*

La producción de electrones en la capa F2 de la ionosfera a latitudes medias y bajas es resultado, principalmente, de la radiación EUV solar. De manera que la frecuencia crítica de la capa F2 (foF2), la cual constituye una medida de la densidad de electrones pico de la ionosfera, varía casi linealmente con este flujo de radiación. Debido a la falta de mediciones directas del EUV solar antes de la era satelital, y dado que las bases de datos ionosféricas datan de principios de la década del 30, se utilizó y se utiliza aun, proxies que se supone que varían linealmente con las variaciones de este rango de radiación solar, como por ejemplo, el número de manchas solares (Rz) o el flujo de radiación solar en 10.7 cm (F10.7). Ambos se miden desde la superficie de la Tierra y sus registros con frecuencia mensual son los de mayor longitud temporal. Sin embargo, como la misma palabra "proxy" lo indica, estos índices no corresponden a la "verdadera" radiación solar en el rango EUV que ioniza la capa F2 ionosférica. Es esperable entonces apartamientos en la relación idealmente lineal entre foF2 y Rz o F10.7. En este trabajo se analiza la estabilidad de la asociación entre foF2 y cuatro proxies de la radiación EUV solar: Rz, F10.7 y dos índices adicionales de uso común en los últimos años que son el Mg II y el flujo Lyman. Este estudio se realiza a través de la variación temporal de los coeficientes que relacionan al parámetro ionosférico con los proxies del EUV solar, de la correlación entre ellos (r) y del error cuadrático medio de los residuos (RMSE). Además, del período que abarca el ciclo solar 23 y 24, durante los cuales la radiación EUV solar varió de manera diferente a la variación mostrada por los proxies, se detectan cambios significativos en los coeficientes de las asociaciones, en r y en RMSE, con los distintos índices. La importancia de detectar este tipo de inestabilidades radica en que estos proxies se usan comúnmente para filtrar el efecto de la actividad solar en parámetros de la atmósfera superior, para luego inferir el rol de otro tipo de forzantes en escalas de tiempo superior a la cuasidecadal, que es la variación más característica de la actividad solar.

Comparación del comportamiento Sq en la Red de Observatorios Magnéticos Permanentes durante 2019-2021

• Patricia Sallago[1]

[1] *Facultad de Ciencias Astronómicas y Geofísicas - Universidad Nacional de La Plata*

Las corrientes ionosféricas de la capa E son las fuentes de las variaciones diarias de los día calmos (Sq). Estas variaciones toman valores del orden de la decena de nT. Los datos registrados deben corregirse por efectos magnetosféricos, para este fin, se utilizaron los índices para la corriente anillo (SMR) provenientes de Supermag (https://supermag.jhuapl.edu). Una forma de evaluar las corrientes equivalentes es suponer una hoja de corriente horizontal en la ionósfera, donde la contribución de las corrientes corticales inducidas se consideran de un tercio de la variación Sq horizontal medida. Se realizó el estudio comparativo de las variaciones Sq en las estaciones de la red de observatorios permanentes de la República Argentina (ROMP) durante el período 2019-2021. Se tomaron los días internacionalmente quietos, provistos por el World Data Center C de Japón y se seleccionaron los que presentaron índice de actividad magnética Kp con valores menores o igual a 2. Se consideraron los registros de las estaciones geomagnéticas de PIL (Pilar, Córdoba), TRW (Trelew, Chubut) y ORC (Islas Orcadas del Sur), datos provenientes de la red Intermagnet, durante el intervalo de tiempo que abarca desde mayo de 2019 y hasta mayo de 2021 inclusive. En particular, puede verse que para el día 19 de abril de 2020, a las 14hs tiempo local, tanto la densidad superficial de corriente equivalente al este KE, como al norte KN es máxima en PIL y mínima en ORC.

Las 5 R de los Residuos de Aparatos Eléctricos y Electrónicos (RAEEs)

Carina Morando,[1,2] • Osvaldo Fornaro[1,2]

[1] *Centro de Investigaciones en Física e Ingeniería del Centro de la Pcia. de Buenos Aires (CIFICEN), UNCPBA - CONICET, Tandil, Argentina*
[2] *Instituto de Física de Materiales de Tandil - Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires*

Reducir, Reparar, Reusar, Recuperar, Reciclar
La masificación de las nuevas tecnologías y la cultura del descarte generaron un nuevo problema socio-ambiental: la acumulación de Residuos de Aparatos Eléctricos o Electrónicos (RAEE) como computadoras, celulares, televisores, heladeras, aires acondicionados, etc. El acceso masivo a estos aparatos, que están diseñados con obsolescencia programada, genera un aumento incesante del volumen de la chatarra electrónica. En Argentina, el problema es creciente: en el año 2010, cada ciudadano generaba 7,5 de RAEE por año, en 2020 unos 10,3 kg y se espera alrededor de 15 kilos en el 2025. En varios países se ha avanzado con legislación sobre la responsabilidad extendida de los fabricantes de esos productos a la hora del descarte, pero Argentina aún no posee normas en ese sentido. Los RAEES requieren una gestión particular diferente a los residuos domiciliarios ordinarios, ya que contienen elementos potencialmente tóxicos si se descomponen y que su fin sea el relleno sanitario es potencialmente peligroso. Adicionalmente, contienen materiales que pueden ser reciclardos (plásticos, metales ferrososos y preciosos, vidrio), materiales reutilizables como repuesto (cables, motores, fuentes, lectoras, imanes) y residuos peligrosos (tubos de rayos catódicos, plaquetas de circuitos integrados, gases de refrigeración, PCB). La recuperación de metales preciosos de la basura electrónica resulta más económica (ambiental y monetariamente) que su extracción convencional, proceso conocido como Minería Urbana. A diferencia de los procesos convencionales para obtener metales preciosos como oro, platino, cobre, paladio, no es necesario excavar y procesar los materiales, ni emplear cantidades impresionantes de agua y/o de energía. Un proyecto de este estilo requiere la actuación de múltiples intérpretes. El material arriba como residuos, que pueden provenir tanto por falla en su funcionamiento, por fin de vida útil, o bien por desuso a partir de obsolescencia programada o percibida, generada por la propia industria. Su tratamiento también variará de acuerdo a esto, ya que algunos dispositivos pueden recuperarse para tener una nueva utilización o funcionalidad, mientras que otros son normalmente descartados como residuos domiciliarios [1].
El objetivo de este trabajo es caracterizar la composición relativa de los RAEEs en forma de metales recuperables y de materiales no reutilizables, para finalmente generar procedimientos de recuperación de esos metales a partir de los residuos tecnológicos que puedan ser utilizados por las cooperativas y/o gestores de RAEEs, así como la posible utilización segura de los materiales no utilizados en el primer caso.

Referencias:
[1] Datos y procedimientos del Centro de Pre tratamiento y Recuperación de Aparatos Eléctricos y Electrónicos (CePRAEE - Res HCA 288/19), gestionado conjuntamente por el Municipio de Tandil y la Facultad de Ciencias Exactas de la UNCPBA.

Plataforma COSECHEROS para el registro y estudio de eventos meteorológicos extremos

Alejandro Ismael Silva,[1] Tomás G. Osiecki,[1] Andrés Lighezzolo,[2,3] Diego H. Pons,[4] • Lucía Elizabeth Arena[1,3]

[1] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*
[2] *Comisión Nacional de Actividades Espaciales (CONAE) Centro Espacial Teófilo Tabanera*
[3] *Observatorio Hidrometeorológico Córdoba*
[4] *Instituto Nacional de Tecnología Agropecuaria (INTA)*

La región central de Argentina es una zona donde se producen eventos meteorológicos extremos (EME) tales como tornados, inundaciones repentinas, tormentas eléctricas con una alta tasa de descargas eléctricas y granizadas con hidrometeoros de gran tamaño. En el este trabajo se presenta la plataforma COSECHEROS permite incorporar los datos meteorológicos obtenidos desde sitios oficiales (SMN, TerraMA2, OHMC) combinados con los registros de eventos meteorológicos-granizadas, inundaciones, heladas, etc.-realizados por la comunidad a través de una aplicación móvil para Android o de redes sociales como TWITTER. Es una plataforma abierta de ciencia ciudadana que interactúa en forma bidireccional entre los/las agentes de investigación y los ciudadanos/nas, permitiendo el mapeo de la información multimedia de eventos meteorológicos extremos. Los resultados de los datos elaborados vuelven a los afectados/das, que así lo requieran, con el valor agregado de información de vulnerabilidad agropecuaria.

Estudio de la contribución de fuentes móviles en el PM10 medido en Monterrey (México) durante la suspensión de actividades por COVID-19

• Constanza Zuniga Villarreal,[1] Adriana Ipiña,[2] Gamaliel López-Padilla,[3] Jair Rafael Carrillo Avila,[4] Ruben D. Piacentini[2]

[1] *Facultad de Ciencias Físico Matemáticas - UANL*
[2] *Instituto de Física de Rosario, CONICET-UNR*
[3] *Centro de Investigación en Matemáticas, CONACYT, México*
[4] *Dirección de Gestión Integral de la Calidad del Aire, Secretaría de Desarrollo Sustentable de Nuevo León, México*

El Material Particulado de tamaño menor o igual a 10 micrómetros (PM10) tiene origen natural y antropogénico, en este último se encuentran las fuentes móviles (transporte) y las fijas (industrias, emprendimientos entre otras). Desde 1992, el gobierno del Estado de Nuevo León mide la calidad del aire por medio del Sistema de Monitoreo Ambiental (SIMA). Actualmente el PM10 se registra en 14 estaciones distribuidas en el Área Metropolitana de Monterrey (AMM). Esta urbe es de las más contaminadas en el continente americano, solo en el año 2019 sobrepasó más de la mitad de los días la Norma Oficial Mexicana de la concentración de PM10. A principios del año 2020, la pandemia de COVID-19 derivó en una serie de acciones gubernamentales que incluyeron la suspensión de actividades no esenciales, para reducir la movilidad y la aglomeración en los espacios públicos. Esta medida permitió investigar la contribución de las fuentes móviles en los niveles de concentración del material particulado. En el presente estudio analizó la variación del promedio mensual de PM10 del año 2020 durante la implementación de estas medidas y su comparación con el periodo de referencia 2015-2019. Estos resultados muestran una reducción de la concentración de PM10 en la mayoría de las estaciones (hasta 50% en horas pico), excepto en dos estaciones al sur del AMM. No obstante, la concentración de este contaminante tuvo un incremento en los meses de Septiembre-Octubre, mientras que en Noviembre-Diciembre obtuvo valores similares respecto a años anteriores. coincidente con una recuperación de la actividad. Se discute la influencia de las fuentes de energía fija (hábitat, producción energética, comercio, industria) y de energía móvil (vehículos) en los niveles de PM10 en cada estación del AMM.

Producto de actividad eléctrica derivada del sensor GLM del satélite GOES-16 para apoyar el monitoreo de granizadas

Andrés Lighezzolo,[1] Alejandro Ismael Silva,[2] Tomás G. Osiecki,[2] Diego Hernán Pons,[3] • Lucía Elizabeth Arena[1,2]

[1] *Observatorio Hidrometeorológico Córdoba*
[2] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*
[3] *Instituto Nacional de Tecnología Agropecuaria - Conicet*

Las tormentas son clasificadas como severas cuando producen alguno o varios de estos efectos: lluvias torrenciales, fuertes vientos y granizadas e importante actividad eléctrica (rayos y relámpagos). En general, es posible asociar la producción de descargas eléctricas a la de granizos. En este trabajo se utiliza un producto que calcula tasas de descargas eléctricas obtenidas a partir de datos del sensor GLM del satélite GOES 16 para apoyar el monitoreo de caída de granizo que es esencial en los estudios de vulnerabilidad agroclimáticos. Las tasas de descargas eléctricas (TDE), son agrupadas en modo Flash, y clasificadas en diferentes intensidades. Los datos de GLM son generados cada 20 segundos y se descargan utilizando el servicio AWS (Amazon Web Services) en la configuración Full-Disk. Cada flash es identificado con un punto georreferenciado y cada archivo se acumula durante un período de 10 minutos. Una vez obtenido el acumulado de las descargas eléctricas, los puntos georreferenciados son transformados a una imagen digitalizada georreferenciada (raster) que da cuenta del número de flashes por píxel. El tamaño del píxel es de 10 km coincidente con la resolución nativa del sensor. El producto final es un mapa de las tasas máximas de descargas eléctricas producidas durante el desarrollo de la tormenta. El mapeo de la TDE fue aplicado a dos tormentas graniceras ocurridas en la provincia de Córdoba-Argentina en enero de 2021, con resultados positivos respecto de la geolocalización-temporal de los granizos caídos. La metodología desarrollada tiene el potencial de ser una herramienta valiosa para estudiar la correlación entre los granizos caídos en tierra y las descargas eléctricas, tema de gran interés en la Física de la Atmósfera.

Variación de tendencias a largo plazo en foF2 utilizando distintos índices de actividad solar

• Gustavo M. Meneses Ancalle,[1] Gloria Tan Jun Rios,[1] Atuel E. Villegas Andina,[1] Matias Cornet,[1] Blas F. de Haro Barbas,[1,2,3] Valentin Venchiarutti,[1,3] Ana G. Elias[1,2,3]

[1] *Facultad de Ciencias y Tecnología, Universidad Nacional de Tucumán*
[2] *Instituto de Física del Noroeste Argentino, CONICET-UNT*
[3] *Laboratorio de Ionosfera, Atmosfera Neutra y Magnetosfera - LIANM, FACET, UNT*

A partir del auge de los estudios sobre cambio climático en la troposfera, surgió un gran interés también por el análisis de tendencias a largo plazo en la atmósfera superior que comenzó a principio de la década del 90. En particular, se publicaron varios trabajos sobre tendencias en la ionosfera, algunos de los cuales las asocian al aumento de concentración de gases de efecto invernadero, y otros a causas naturales como variaciones a largo plazo en la actividad solar, en la actividad geomagnética y en el campo magnético intrínseco de la Tierra. Respecto a las consecuencias que el efecto invernadero tendría en la atmosfera superior, los modelos predicen un enfriamiento en la termosfera y una disminución de su densidad, junto con un descenso de la altura de pico de la capa F2 (hmF2) en la ionosfera y un decrecimiento de la frecuencia crítica de la capa F2 (foF2) a nivel global, entre otros. Sin embargo, el patrón global de tendencias de hmF2 y foF2 estimado con mediciones de diversas estaciones del mundo durante las últimas décadas, es muy complejo y no estaría de acuerdo completamente con la hipótesis del efecto invernadero. Un factor determinante en el cálculo de estas tendencias, es el proceso de filtrado de los parámetros ionosféricos. Esto se debe a que la variabilidad de los mismos está determinada, casi en un 90%, y a veces más, por la radiación EUV solar la cual varía con la actividad solar. De manera que, para detectar tendencias, que a lo sumo corresponderían al 10% restante de variabilidad, es necesario aplicar algún método de filtrado. En general, estos métodos se basan en el análisis de los residuos de regresiones entre los parámetros ionosféricos y proxies de la radiación EUV solar. Las tendencias de largo plazo se determinan luego a partir de estos residuos, por lo que resultan sensibles al proxy utilizado en el filtrado. En este trabajo se analizan cuatro proxies de la radiación EUV solar: Mg II, flujo Lyman, F10.7 y Rz, para estudiar el efecto de cada uno de ellos sobre los valores de la tendencia en foF2 medido en tres estaciones ionosféricas de Japón. Los valores de las tendencias obtenidas resultan sensibles no solo al proxy considerado, sino al tipo de regresión, y al período considerado.

Dispositivo remoto para la estimación de la constante dieléctrica del suelo a partir de señales GNSS

• María Belén Rodríguez,[1,2] Carolina Millauro[1,2]

[1] *Instituto de Astronomía y Física del Espacio, CONICET- UBA, Buenos Aires, Argentina*
[2] *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*

Se desarrolló un dispositivo automatizado que permite estimar la constante dieléctrica de superficies reales -relacionada con la humedad de los mismos- utilizando señales GPS. El mismo puede ser controlado de manera remota a partir de una comunicación bidireccional que se puede efectuar desde cualquier sitio a través de la red 3G de telefonía celular. El dispositivo es capaz de configurarse y reconfigurarse automáticamente, antes de comenzar la medición y durante la misma, como así también de optimizar sus funciones reduciendo su consumo eléctrico. Utilizando como fuente de alimentación una batería de tensión continua recargable junto a un panel solar se obtiene un equipo independiente y autosuficiente que permanece continuamente activo, a la espera de la orden para comenzar la medición. Este dispositivo es capaz de seguir la trayectoria de los satélites. De los datos captados por la antena se extrae el ángulo de elevación del satélite y la intensidad medida por la misma, que es la suma coherente entre la señal directa emitida por el GPS y la reflejada por la superficie iluminada. Estas magnitudes son enviadas al sitio web Firebase Storage, lo cual permite medir y guardar dichos datos de manera automatizada. A partir de la señal medida en la antena puede estimarse la constante dieléctrica del suelo calculando el patrón de interferencia generado por la señal directa del GPS y la reflejada por la superficie iluminada. Para analizar la señal adquirida y obtener la constante dieléctrica del suelo se desarrolló un algoritmo que ajusta la medición usando un modelo de dispersión electromagnética basado en el método de pequeñas perturbaciones. Los ajustes para obtener la constante dieléctrica son consistentes con mediciones tomadas in situ utilizando un sensor de humedad comercial.
Podemos concluir que este trabajo de hardware y software, de sencilla arquitectura y de fácil replicación, genera un impacto novedoso en las aplicaciones de teledetección, dado que permite obtener diversos parámetros biofísicos de interés dentro de una amplia variabilidad espacial en escalas regionales a través del uso de señales de oportunidad GNSS. A su vez, al ser un dispositivo automatizado, autónomo y sincrónico no requiere de la presencia de un operador al momento de adquirir mediciones características que, sin lugar a dudas, son fuertes ventajas por sobre las técnicas actuales utilizadas para medir la humedad del suelo.

Trayectoria de hidrometeoros -lluvia y granizo- de una tormenta severa de Córdoba, Argentina

• Lucía Elizabeth Arena,[1,2] Andrea Rico,[3,4] Ricardo Ingaramo,[1,5] Raúl Comes[2]

[1] *Observatorio Hidrometeorológico Córdoba*
[2] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*
[3] *Centro de la Región Semiárida*
[4] *Instituto Nacional del Agua*
[5] *Facultad de Ciencias Exactas Físicas y Naturales - Universidad Nacional de Córdoba*

Gran parte de la provincia de Córdoba en Argentina forma parte de una región en la que se producen tormentas severas con producción de un importante volumen de hidrometeoros sólidos, con granizos de tamaño récord como el "coloso Victoria" caído en febrero de 2018 con dimensiones de más de 17 cm de largo. Es de interés caracterizar estas tormentas en función de datos meteorológicos obtenidos por diferentes fuentes, instrumentos de información remota como radar, satélite, estaciones meteorológicas, y los registros aportados por los ciudadanos/as, en programas como MATTEO o COSECHEROS. En estos últimos, voluntarios/as colaboran con el trabajo científico manteniendo el instrumental o recuperando datos y/o muestras. En el presente trabajo se integran los datos obtenidos por las diferentes fuentes para mapear temporo-espacialmente la trayectoria de la tormenta granicera del 8 de febrero de 2018 que abarcó más del 50% de la superficie de la provincia de Córdoba.

Extender el laboratorio para enseñar física en escenarios educativos híbridos

• Ignacio J. Idoyaga[1]

[1] *Departamento de Fisicomatemáticas, Facultad de Farmacia y Bioquímica, Universidad de Buenos Aires*

La pandemia de COVID-19 y las consecuentes medidas sanitarias obligaron a las instituciones educativas a desplegar dispositivos de Enseñanza Remota de Emergencia (ERE) para garantizar la continuidad pedagógica incorporando mediaciones tecnológicas. El análisis de estos modos de trabajo constituye un punto de partida en la definición de lineamientos para la enseñanza en los nuevos escenarios educativos híbridos. La enseñanza de la física se vio especialmente interpelada en la emergencia. Esta disciplina encuentra en la actividad experimental uno de sus modos privilegiados de conocer. Es decir, los trabajos prácticos en el laboratorio son especialmente valorados y se los reconoce como estrategia de elección para la enseñanza de cuestiones íntimamente relacionadas a la manera de construir conocimiento científico. Sin embargo, estas actividades fueron difíciles de sostener en entornos digitales. Metafóricamente, si bien se logró extender el aula, resta el desafío de extender el laboratorio. La necesidad de investigar la ERE y de articular accesiones tendientes a recuperar la actividad experimental como elemento medular de la educación en ciencia y tecnología, llevó al Centro de Investigación y Apoyo a la Educación Científica a plantear el Modelo de Laboratorio extendido (LE). El LE puede entenderse como el uso didáctico y sistémico de dispositivos y estrategias para llevar adelante actividades experimentales en entornos educativos digitales. Es decir, el LE no es una única aproximación, sino el establecimiento de un híbrido experimental, donde distintos recursos actúan de manera sinérgica con el objetivo de aumentar la probabilidad de que se generen aprendizajes de procedimientos, actitudes y conceptos. El modo de trabajo en la lógica del LE incluye con relativa centralidad el uso de Laboratorios Remotos (LR). Los LR son un conjunto de tecnologías hardware y software que permite a profesores y estudiantes llevar a cabo actividades experimentales reales en entornos digitales. La manipulación del equipamiento se realiza a distancia, pudiendo acceder desde cualquier parte del mundo en cualquier momento. Se trata de actividades que permiten el tratamiento de datos empíricos con la incertidumbre asociada al proceso de medición y un alto nivel de sofisticación. El desarrollo de secuencias de enseñanza y aprendizaje en la lógica del LE encuentra su mejor versión cuando se articula a partir de la investigación basada en diseño. Sin embargo, los lineamientos generales del modelo teórico y el conocimiento de dispositivos como los LR brindan, por sí mismos, oportunidades concretas de mejora para las propuestas de enseñanza en todos los niveles de la educación.

Integración de nuevas herramientas computacionales en un laboratorio de enseñanza universitaria de física en modalidad virtual

• Adan Garros,[1] Verónica Pérez Schuster,[1,2] Natalia Philipp[1,3]

[1] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, 1428 Buenos Aires, Argentina.*
[2] *Instituto de Biociencias, Biotecnología y Biología Traslacional, FCEN-UBA-CONICET.*
[3] *Instituto de Física de Buenos Aires (IFIBA, UBA-CONICET)*

La inclusión de la computación como parte integral de la enseñanza de la física de nivel universitario fue ampliamente discutida y apoyada [1]. Aun así, no hay consenso respecto a si una inclusión efectiva puede ser gradual (no disruptiva); o si debe darse obligadamente en el marco de cambios en los planes de estudio existentes. En este sentido, existen formulaciones taxonómicas que permiten abordar aspectos de la computación en la enseñanza de la física: datos; modelado y simulaciones; resolución de problemas; y teoría de sistemas [2].

Por otra parte, en el contexto de aislamiento por la pandemia de COVID-19, la mayor parte de las unidades académicas debieron reformular y poner en práctica nuevas metodologías de enseñanza en modalidad virtual. En el caso de los laboratorios de enseñanza, esta situación resultó aún más crítica: las prácticas experimentales tradicionales debieron ser adaptadas a un contexto de virtualidad que preserve la calidad de la formación de los estudiantes.

En esta ocasión presentamos nuestro trabajo docente enfocado en la integración de nuevas herramientas computacionales en un laboratorio de enseñanza de física universitaria en modalidad virtual: Laboratorio de la materia de Física 1 para estudiantes de las carreras de la Lic. en Ciencias Químicas y Lic. en Ciencias de Datos, ofrecido por el Dpto. de Física de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad de Buenos Aires. Durante la materia, se introdujo a los estudiantes en nociones básicas de programación en Python en un entorno colaborativo (Google Colab), tanto para el análisis de datos de experimentos caseros como para el modelado de fenómenos físicos. En este trabajo se presentarán los recursos utilizados y su implementación en modalidad virtual; así como la experiencia general resultante de la aplicación de ese plan de trabajo desde la perspectiva de docentes y estudiantes.

Referencias:

[1] N. Chonacky, D. Winch., *Integrating computation into the undergraduate curriculum: A vision and guidelines for future developments*, Am. J. of Phys. **76:4**, 327 (2008). DOI
[2] D. Weintrop, E. Beheshti, M. Horn, *et al.*, *Defining Computational Thinking for Mathematics and Science Classrooms*, J. of Sci. Educ. and Technol. **25**, 127 (2016). DOI

Bernoulli mal entendido y la moneda saltarina

• Martín Monteiro,[1] Mateo Dutra,[2] Álvaro Suárez,[3] Arturo Martí[2]

[1] *Universidad ORT Uruguay*
[2] *Instituto de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Uruguay*
[3] *Instituto de Profesores Artigas. Consejo de Formación en Educación. ANEP. Uruguay*

Un tema popular en los cursos de física, así como en divulgación científica, es la ecuación de Bernoulli. De esta se deduce que a mayor velocidad, menor es la presión; un resultado bien conocido, pero del que a menudo se abusa. Algunas veces se aplica incorrectamente porque no se consideran las condiciones bajo las cuales es válida su derivación. Uno de los muchos experimentos clásicos en los que se invoca este principio es soplar una moneda que se encuentra apoyada sobre una mesa, para hacerla saltar hacia el interior de una taza. Para demostrar que una mayor velocidad no implica necesariamente una menor presión, proponemos realizar un experimento con una moneda colocada en un hueco, de tal forma que la cara superior de la moneda queda a ras de la superficie. Lo que se observa con este sencillo experimento es que la moneda no salta. También proponemos un experimento cuantitativo para medir la fuerza hacia arriba sobre la moneda, para diferentes espesores de moneda. Se comprueba experimentalmente que la fuerza aumenta con el espesor y en particular que la fuerza es nula cuando el espesor es cero, es decir, cuando el flujo de aire no se deforma.

Eclipse 2020: una oportunidad para la enseñanza y divulgación de temas de astronomía

• Mara Olavegogeascoechea,[1] Susana B. Ramos,[1,2] Ana M. Basset,[1] Adriana Cárdenas,[3] Fernando Merino,[3] Pablo Basaez,[3] Beatriz García[4]

[1] *Depto. de Física - Fac. de Ingeniería - Universidad Nacional del Comahue*
[2] *Instituto de Investigación y Desarrollo en Ingeniería de Procesos, Biotecnología y Energías Alternativas*
[3] *Facultad de Ingeniería - Universidad Nacional del Comahue*
[4] *Instituto de Tecnologías en Detección y Astropartículas, CONICET-UNSAM-CNEA*

El año 2020, es un año que quedará en la memoria de todo habitante del planeta, no sólo por la situación que nos tocó vivir como ciudadanos sino porque ha permitido ver entre otras cosas el trabajo científico en acción. Además de la pandemia mundial del COVID19, nuestra región tuvo una gran oportunidad para no dejar pasar: el eclipse total de Sol del 14 de Diciembre del 2020. Son pocas las oportunidades en que un fenómeno astronómico pueda ser vivido de manera directa, observado, analizado, explicado. Nuestra zona fue uno de los escenarios privilegiados para la observación del evento, dado que la franja de totalidad atravesó las provincias de Río Negro y Neuquén. Esta situación fue aprovechada por nuestro grupo de trabajo, constituido por docentes de la UNComahue, estudiantes del Profesorado en Física y astrónomos, para generar una oportunidad especial de enseñanza/aprendizaje, ingresando, a través de sus docentes, a las aulas de las escuelas de nivel primario y secundario. Fue un contexto muy apropiado para poder generar propuestas de enseñanza y formación en temas de astronomía. Fue necesario además, contribuir a informar a la población en general para brindar las herramientas y conocimiento certero que garantizara el disfrute del eclipse solar observándolo en forma segura. En esta contribución se describirán las diferentes acciones coordinadas que realizamos para recibir el eclipse. Éstas incluyeron como eje principal el dictado del "Taller de Astronomía y Astrofísica" con la participación de más de 60 docentes de las provincias de RN y NQN, que se planteó a modo de capacitación, y como oportunidad para que los docentes ampliaran y actualizaran sus conocimientos en este campo. Específicamente se desarrollaron los talleres del programa NASE [1] de la Unión de Astronomía Internacional (IAU), consistente en una serie de módulos teórico-prácticos sobre didáctica de la astronomía y astrofísica, con énfasis en tópicos relacionados al eclipse total, y de abordaje interdisciplinar en sintonía con el enfoque de las currículas actuales en Ciencia Naturales de ambas provincias de RN y NQN. Fue una de las primeras experiencias de dictado masivo virtual en el país y gracias a ello permitió que docentes de lugares recónditos del interior de RN y NQN pudieran acceder al mismo, pues de forma presencial les hubiera sido imposible. En el taller se brindaron las herramientas para que los docentes generen sus propios recursos didácticos, incluyendo la construcción de equipos de bajo costo y el trabajo con simuladores, para poder ser bajados a las aulas de acuerdo al grupo al que dirijan sus propuestas. El programa de actividades de formación y extensión incluyó además el desarrollo de conferencias virtuales, talleres y charlas dirigidas a la población en general, producción y distribución de material especial para observar el eclipse en forma segura, tales como cámaras oscuras y lentes certificadas distribuidas a unas 60.000 personas a lo largo y más allá de la franja de la totalidad. Para ello fue fundamental contar con la colaboración de la red de docentes generada a través del curso-taller NASE realizado, los cuales actuaron como agentes multiplicadores trasmitiendo los conocimientos adquiridos, distribuyeron el material y generaron material propio tanto para sus estudiantes como para la población en general de sus propias comunidades. Fue posible además distribuir material especial de "observación" del eclipse para personas con discapacidad visual, que consistió en libros táctiles ("Abre tus sentidos a los eclipses: Sudamérica") preparado por la Universidad of Edinburgh (USA) e impresos por la NASA, y 10 detectores que transforman la luz en sonido (LightSound) de la Universidad de Harvard [2]. Finalmente, el conjunto de actividades realizadas, el aprendizaje y los logros obtenidos a través de este programa de extensión especial originado con motivo del eclipse 2020, serán destacados documentando y testimoniando los resultados de esta maravillosa experiencia.

Referencias:

[1] Ros, R.M. *et al.*, Network for Astronomy School Education, (2021).
[2] Byerila, A. *et al.*, *Proceedings Communitating Astronomy with the Public*, (2021). In press.

Estudio teórico-experimental de la dinámica del movimiento circular vertical con fricción

• Raúl Cortés-Maldonado,[1] Mary Carmen Gómez Conde,[2] Carlos Bueno Avendaño,[1] José Federico Casco Vásquez[1]

[1] *TECNOLÓGICO NACIONAL DE MÉXICO / INSTITUTO TECNOLÓGICO DE APIZACO*
[2] *UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE PUEBLA*

Un problema típico en cursos introductorios de física del nivel universitario es aquel en el que una partícula se mueve en un aro vertical [1]. Este problema y sus variantes ha sido ampliamente estudiado en la literatura debido a que permite aplicar conceptos tales como conservación de la energía mecánica y fuerzas de contacto [2-7]. En este trabajo se presenta un estudio teórico-experimental de la dinámica del movimiento circular vertical con fricción. En el análisis teórico se analiza y resuelve una ecuación diferencial de Bernoulli que permite calcular la rapidez y fuerza normal, la fuerza de fricción se modela como $f = \mu F_N$, donde F_N es la fuerza normal y μ es el coeficiente de fricción cinética. En el estudio experimental se utilizan fotopuertas para medir la posición angular de la esfera como función del tiempo, a partir de esto, se obtiene de manera indirecta la rapidez y fuerza normal en cualquier posición angular de la esfera. Debido a la presencia de la fricción, el valor final de la rapidez y fuerza normal es del 40% y 60% de su valor inicial, respectivamente. Finalmente, al comparar los resultados teóricos y experimentales obtenidos de forma indirecta para la rapidez y fuerza normal se observa que el modelo teórico describe de forma cualitativa el comportamiento experimental cuando $\mu = 0.12$.

Referencias:

[1] A. Bettini, *A Course in Classical Physics 1—Mechanics, Undergraduate Lecture Notes in Physics*, Springer International Publishing, (2016).
[2] F. d. Simoni, *Velocidade mínima para completar um loop circular vertical: uma abordagem cinemática*, Rev. Bras. Ensino Fís. **40** (2018).
[3] I. A. C. Melnik, V. d. A. Oliveira, *Análise do movimento de uma partícula em um loop circular vertical usando nções de limite*, Rev. Bras. Ensino Fís. **42** (2020).
[4] L. P. Franklin, P. I. Kimmel, *Dynamics of circular motion with friction*, Am. J. Phys. **48**, 3 (1980).
[5] I. Richard Lapidus, *Circular motion with sliding friction*, Am. J. Phys. **49**, 883 (1981).
[6] W. K Iobus, *Motion on a vertical loop with friction*, Am. J. Phys. **79**, 913 (2011).
[7] O. Bertran, J. Riba, *A revised solution for a sphere rolling in a vertical loop*, Eur. J. Phys. **42**, 015008 (2020).

Fluidos de bajo Reynolds: estudio de la desviación de la esfericidad en cuerpos que se mueven en medios viscosos

• Raúl Florentin,[1,2] José Eduardo Contento,[1] Monica Miralles[1,3]

[1] *Laboratorio de Biomecánica e Ingeniería para la Salud, Facultad de Ingeniería y Ciencias Agrarias, Pontificia Universidad Católica Argentina*
[2] *Facultad de Ingeniería - Universidad de Buenos Aires*
[3] *Centro de Investigación en Diseño Industrial de Productos Complejos-Facultad de Arquitectura, Diseño y Urbanismo-Universidad de Buenos Aires*

El estudio del movimiento lento de fluidos viscosos es de enorme utilidad práctica en ciencia y tecnología. El movimiento de los gases y líquidos a través de lechos y medios porosos, el flujo de suspensiones, el crecimiento de las gotas de lluvia por colisiones a partir de gotas pequeñas, así como muchos problemas de contaminación atmosférica requieren un conocimiento de cómo las partículas pequeñas se mueven a través de los fluidos. El estudio del flujo viscoso lento se inició hace más de 100 años, pero todavía quedan innumerables fenómenos sin explicar y otros nuevos van surgiendo como el modelado del movimiento de partículas no esféricas, la colisión e interacción de esferas en flujos no uniformes, o el movimiento de partículas deformables, sistemas multipartículas, entre otros. Los flujos de Stokes se pueden introducir como un tema de investigación a partir de prácticas especialmente diseñadas en el laboratorio, en cursos de física o de mecánica de fluidos, especialmente en aquellos orientados a estudiantes de ingeniería ambiental o en alimentos. En este trabajo se presenta un equipo diseñado e instrumentado para realizar estudios experimentales de flujos de bajo Re que permiten estudiar la dependencia de la fuerza de drag con la forma y dimensiones de las piezas diseñadas -con orientación paralela o perpendicular a la dirección del flujo- de: a) esferas, b) discos planos, c) cilindros y d) formas esferoidales (proladas u obladas). Se trata de poder discriminar, en cada caso, el aporte a la fuerza drag total debida a la superficie o al volumen del objeto cuando alcanza la velocidad límite. Se establecen las comparaciones en función del volumen equivalente o del radio de Stokes. Finalmente se explora el comportamiento de la fuerza de drag en arreglos lineales, bidimensionales y tridimensionales. Se presentan observaciones de la fuerza drag conservando el valor de la superficie para diferentes formas y de la sensibilidad del drag respecto al aumento de la superficie para una forma dada.

Medición de susceptibilidades magnéticas usando un diseño experimental simple

• Claudio J. Bonin,[1,2] Fernando José Bonetto[1,2]

[1] *Dpto. de Física, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral*
[2] *Instituo de Física del Litoral, CONICET-UNL*

Las propiedades magnéticas de cualquier sustancia en la naturaleza, pueden condensarse, en términos generales, en un único parámetro: la susceptibilidad magnética volumétrica χ_V. Su valor y su signo indican si un dado material repele campos magnéticos (diamagnéticos) o atrae campos magnéticos (paramagnéticos o ferromagnéticos). Mediciones precisas de χ_V en sustancias paramagnéticas o diamagnéticas son generalmente realizadas con dispositivos sofisticados, y usando métodos con cierto grado de complejidad, debido a su pequeño valor. Esto hace poco factible su determinación en laboratorios de enseñanza de nivel universitario, a no ser que se usen métodos y dispositivos simples y económicos, los cuales conllevan a resultados poco exactos de la susceptibilidad (según valores tabulados en la bibliografía). Aquí mostramos un método simple y práctico para medir con buena precisión y exactitud χ_V de sustancias paramagnéticas y diamagnéticas, usando una balanza electrónica e imanes de neodimio, los cuales son comunes en laboratorios de enseñanza de nivel universitario. La fuerza producida por los imanes sobre una dada muestra es sensada por la balanza, y contrastada con cálculos exactos de la fuerza magnética sobre la muestra entera. Se optimiza tanto la forma como el tamaño de la muestra, como también el número de imanes para maximizar la fuerza magnética sobre la muestra, y en consecuencia, minimizar errores experimentales en la determinación de χ_V.

La enseñanza de la física en el contexto de los fenómenos complejos del S XXI: Ciencia postnormal y abordaje STEAM

• Irene Arriassecq[1]

[1] *ECienTec, Facultad de Cs. Exactas, Universidad Nacional del Centro de la Pcia. de Bs. As (UNICEN) CONICET*

La educación STEAM integrada (iSTEAM), con su adición de artes a las disciplinas STEM -acrónimo en inglés de Ciencias, Tecnología, Ingeniería y Matemáticas-, es un enfoque complejo, no exento de críticas, que se centra en la resolución de problemas relevantes, que deberían ser cercanos a los estudiantes de los distintos niveles educativos y con abordajes interdisciplinarios y transdisciplinarios que promete ser pertinente en una etapa de la humanidad donde los problemas científicos son, también, cada vez más complejos (Greca, Ortiz-Revilla y Arriassecq, 2021). Un abordaje STEAM requiere, entre otros aspectos, discutir en primer lugar qué cuestiones de naturaleza de la ciencia son relevantes para caracterizar justamente de que tipo ciencia estamos hablando. La noción de ciencia postnormal puede constituirse en una perspectiva adecuada para los abordajes STEAM. Funtowick y Ravetz (2000), quienes plantean el concepto de ciencia postnormal, sostienen que la ciencia evoluciona cuando es capaz de dar respuesta a los principales desafíos de cada época. En la actualidad podemos plantear como ejemplos: riesgo ambiental global, inequidad entre los pueblos, epidemias, pandemias, etc. Como consecuencia de los problemas globales, se están desarrollando nuevos estilos de actividad científica. Fundamentalmente se están superando las oposiciones tradicionales entre disciplinas pertenecientes al campo de las Cs. Sociales y de las Cs. Naturales y entre ciencias "duras" y ciencias "blandas". Gran parte del éxito de la ciencia "tradicional" (normal, en términos kuhnianos) se debe a su poder para abstraerse de la incertidumbre, tanto en el conocimiento como en los valores. En educación es habitual abordar "hechos incuestionables". Sin embargo, estamos atravesando una época en la cual existen diversos problemas que amenazan incluso la supervivencia de la humanidad, con impactos de larga duración. En este contexto, los nuevos problemas tienen rasgos comunes que los distinguen de los problemas científicos tradicionales: son complejos y la ciencia no siempre puede construir teorías que puedan explicarlos y realizar predicciones que puedan contrastarse con los hechos. Frecuentemente se construyen modelos matemáticos y simulaciones computacionales.

Influencia del docente y el proceso educativo inter disciplinar. Ínter-cátedra Sensum

• Cristián Antiba[1]

[1] *Grupo de Experimentación Innovativa e Instrumental - UNR*

"Si un docente tiene dañada su propia autoestima quiere imponer actividades por el respeto, por el miedo, por la autoridad, por "esto lo hacéis" porque lo mando yo. Si el estudiante resulta una persona equilibrada, afectiva, empática, con autoestima buena pues imagínate. En cambio si ese estudiante, que luego ocupará un cargo docente tiene una baja autoestima, va a terminar por reproducir luego de recibir ese maltrato, sobre sus alumnos sus problemas. Un mal profesor sin educación emocional puede arruinarte la vida y, en cambio, un buen profesor con sensibilidad te la puede cambiar", dice Begoña Ibarrola. El rendimiento académico, por lo general, es la capacidad de responder satisfactoriamente a un patrón establecido, es decir, de encajar en el sistema, y cuando ello sucede ocurre que automáticamente hay una respuesta favorable a la empatía que esa actitud representa, lo cual de alguna manera contamina el fenómeno que deseamos estudiar, ya que no se restringe a la actitud, sensibilidad y capacidad del docente para con todos los alumnos, sino que se trata de una conexión especial con ese alumno que responde tan bien a lo esperado. Es algo muy lógico que suceda. "Todos tenemos o hemos tenido alumnos estrella que es un placer ver cómo responden de bien a lo esperado, es decir a lo que uno como docente espera o ha definido como ideal... o sea, a lo que nos resulta más cómodo, ya sea porque nos refleja, o lo hemos aceptado como lo más conveniente, y nuestro trato para con dicho estudiante se vuelve muy cordial". Analizamos analogías de crisis en Física, con otras disciplinas. CRISIS etapas:
1. HECHO DISRUPTIVO: Acontecimiento que provoca una ruptura con la regularidad, los marcos cotidianos. Este quiebre provoca la 1er ETAPA: Confusión desestructurante. Sentimientos de ansiedad, miedo, desamparo de marcos reguladores. 2da ETAPA: Enfrentamiento polemógeno: luego del impacto desestructurante, en grupos humanos se polarizan en dos enfrentados, donde uno es el enemigo del otro. Si no aparece una terceridad que dialectice los polos enfrentados la situación puede permanecer en un enfrentamiento eterno o caer en catástrofe.
2. TERCERIDAD: puede estar representada por otro hecho, persona, proceso que interviene y posibilita la superación de lo antagónico.
3. DUELO: Proceso donde el grupo elabora la pérdida de los marcos referenciales anteriores al HECHO DISRUPTIVO. Si el duelo no es bien transitado, el grupo puede quedar paralizado o entrar en catástrofe y desaparición.
4.CAMBIO:
a. Prospectivo: se construyen nuevos marcos y estructuras, innovación, transformación.
b. Retrospectivo: se vuelve a estructuras antiguas, anteriores y reforma algunas.

Análisis de vídeos en la práctica experimental

• Miguel Re,[1,2] Andrés G. García[3]

[1] *Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación, Universidad Nacional de Córdoba*
[2] *CIII-Materias Básicas - UTN - FRC*
[3] *Universidad Tecnológica Nacional - Facultad Regional Bahia Blanca, Argentina*

La práctica experimental ha sido una de las actividades más afectadas durante la etapa de aislamiento. En la búsqueda de nuevas alternativas para la continuidad de nuestros cursos en este esquema de enseñanza remota de emergencia hemos desarrollado una práctica basada en al filmación de un evento para posterior análisis por parte de los estudiantes que denominamos vídeo experimental. Se reproduce así parcialmente una forma de trabajo usual en un laboratorio de investigación poniendo en contacto al estudiante con nuevas tecnologías favoreciendo el desarrollo de competencias. La práctica se desarrolla en el marco teórico provisto por el Conocimiento Tecnológico, Didáctico y Disciplinar (Technological, Pedagogical, Content Knowledge - TPCK) y la encontramos particularmente útil para prácticos de mecánica. Presentamos aquí el desarrollo para una de las prácticas tradicionales en un primer curso de Física: la medición del período de oscilación de un péndulo. Para la toma de datos se propone a los estudiantes el uso de Tracker, un programa del proyecto Open Source Physics para el análisis de vídeos de uso libre. Se consideran ventajas y desventajas de la propuesta y se plantea un análisis en base a criterios para el aprendizaje en línea, tomando en consideración además que en el retorno a la actividad presencial las limitaciones existentes antes de la pandemia seguirán presentes o incluso estarán agravadas.

'Encuentros de Física': una estrategia para la educación virtual en tiempos de coronavirus

• Damián Gulich[1,2]

[1] *Centro de Investigaciones Ópticas (CIOp - CONICET - UNLP - CICPBA)*
[2] *Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata*

En Argentina, la epidemia de SARS-CoV-2 tuvo consecuencias directas sobre las clases universitarias presenciales, causando un cambio muy radical en la estrategia educativa. En la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de La Plata, a muy poco tiempo de declarada la emergencia sanitaria las clases migraron a un formato virtual, tanto en vivo como en video grabado. En esta presentación cuento cómo mis clases de "Física II" (Electromagnetismo y Óptica) se convirtieron en los "Encuentros de Física", episodios de mi canal personal de YouTube, quedando a disposición libre de los alumnos y del público en general.

Enseñar Física en Pandemia la Experiencia del Departamento de Física de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la UBA

• Laura Morales[1]

[1] *Departamento de Fisica, FCEyN, UBA*

A mediados de Marzo de 2020 Argentina la pandemia de COVID 19 hizo su ingreso en la vida cotidiana de los ciudadanos y ciudadanas. En particular las universidades cambiaron radicalmente la forma en la interacción con sus alumnas y alumnos (investigadoras e investigadores). En el caso de la de Ciencias Exactas y Naturales (FCEN) de la UBA la primera reacción fue post-poner el comienzo durante dos semanas. Luego de este hiato las clases de un gran número de materias se transmutaron en clases virtuales impartidas mediante la plataforma Zoom. En particular, el Departamento de Física amplió su oferta de materias de servicios (para estudiantes de otras carreras de la FCEN) y logró no solo mantener el contacto con su alumnado sino incrementarlo a partir de multiplicar las clases en el canal de Youtube del Departamento. Luego, en el segundo cuatrimestre del 2020 dicho contacto se amplió a partir del envío de "cajas de trabajo" para poder realizar los trabajos de laboratorio. En este trabajo presentaremos un resumen de los cursos dictados por el Departamento de Física y resumiremos los principales problemas encontrados a lo largo del año 2020 y también durante 2021. También comentaremos sobre las estrategias didácticas diseñadas para superar varias de las dificultades que se presentaron durante estos meses y las alternativas que desarrollaremos en 2022.

Valoración de actitudes y creencias científicas en estudiantes novatos de Física General para Odontología en modalidad remota

• Luciana Bonatto,[1] Karina Valenzuela Aracena,[2] Marcelo Jaque Arancibia[1]

[1] *Instituto de Investigación Multidisciplinar en Ciencia y Tecnología, Universidad de La Serena, Raúl Bitrán 1305, La Serena, Chile*
[2] *Departamento de Ingeniería Mecánica, Universidad de La Serena, Benavente, 980, La Serena, Chile*

Se presenta un estudio de la valoración de las actitudes y creencias (AC) de los estudiantes de primer año de Odontología sobre el proceso de enseñanza-aprendizaje de la física durante la enseñanza remota del primer semestre del 2020 y 2021. El objetivo es evaluar la influencia de la docencia impartida sobre las AC de los estudiantes novatos. Se utiliza una herramienta metodológica conocida y validada, el cuestionario CLASS (Adams et al. 2006). Esta herramienta permite conocer la evolución de las AC de los estudiantes acerca de la física y su aprendizaje a lo largo del curso a partir del análisis de la encuesta realizada al inicio y al final del semestre. En el análisis se contrastan las respuestas de los estudiantes con las dadas por un grupo de expertos (docentes, investigadores, estudiantes avanzados de física, entre otros). La metodología de enseñanza consta de actividades que fomentan la discusión en clase, aplicaciones de la física en odontología y una herramienta tecnológica de aprendizaje activo (Isaac Physics) para reforzar las habilidades en la resolución de problemas de forma autónoma y asincrónica. La comparación de los resultados pre y post instrucción muestra que las AC se vieron levemente deterioradas en el 2020, lo que significa que las AC se volvieron menos expertas a lo largo del curso. Por el contrario, para el año 2021 las AC de los estudiantes se volvieron más expertas al final del curso. El análisis de subconjuntos de preguntas que miden aspectos particulares de las AC muestra que existe una mejora significativa en la categoría "conexión de la física con el mundo real". Esto indica la apreciación por parte del estudiante de la importancia de aplicar los conocimientos que aporta la asignatura de física a su futura tarea profesional.

Cuantificación de elementos de difícil determinación mediante la técnica Laser Induced Breakdown Spectroscopy y su aplicación en la detección de residuos de plaguicidas

• Lucila Martino,[1] Cristian DAngelo[1]

[1] *Centro de Investigaciones en Física e Ingeniería del Centro de la Pcia. de Buenos Aires (CIFICEN), UNCPBA - CONICET, Tandil, Argentina*

Desde hace ya unos años, la técnica de Espectroscopía de Plasmas Producidos por Láser (LIBS, por sus siglas en inglés) se ha abierto camino como una técnica de diagnóstico y análisis simple que permite la detección rápida de elementos de interés en diferentes muestras, independientemente de su estado de agregación. Esta técnica consiste en enfocar un láser pulsado de alta potencia en la superficie de la muestra para generar un plasma de temperatura y densidad electrónica elevadas, proporcionando así información sobre los elementos que componen la muestra a nivel atómico. Mediante la aplicación de la técnica LIBS, se propuso la detección y cuantificación de residuos de plaguicidas, precisamente clorpirifos (C9H11Cl3NO3PS) y dimetoato (C5H12NO3PS2), sobre hortalizas de hojas verdes. Para este fin, se realizaron muestras de referencia mediante la utilización de los plaguicidas anteriormente nombrados, con concentraciones crecientes, en un rango de 0–80 mg/kg y 0-250 mg/kg, respectivamente. De esta forma se propone la cuantificación de estos plaguicidas mediante el estudio de las líneas de emisión que los componen, más precisamente S (416.26 nm), P (460.21 nm) y Cl (837.59 nm). Cabe destacar que estos elementos son de difícil determinación, no sólo con la técnica propuesta, sino también con otras técnicas analíticas, es por esto que se realizó un estudio exhaustivo que permitió encontrar las condiciones óptimas para su determinación. Las líneas seleccionadas, los arreglos experimentales y los tiempos de medición fueron elegidos para cada elemento, con el objetivo de garantizar intensidad máxima, que las líneas en cuestión se encuentren relativamente aisladas y libres de interferencias con líneas de elementos posiblemente presentes en las muestras y por último, que permitan la realización de curvas de calibración respetando las condiciones de plasma delgado. Por otra parte, debido a ciertas limitaciones en el registro de las líneas elegidas, se procedió a realizar las mediciones en condiciones de baja presión y en el caso del Cl, también fue necesario un reajuste en el equipo experimental utilizado, donde se optó por cambiar la configuración espacial, buscando el incremento de señal a partir de un aumento en el registro de la columna de plasma. Una vez obtenidos los registros de señales en cada muestras y luego de su procesamiento, se construyeron curvas de calibración mediante la gráfica de la intensidad neta de líneas frente a las concentraciones crecientes correspondientes a cada elemento. Con el fin de evaluar el rendimiento analítico del método cuantitativo LIBS, se procedieron a realizar pruebas de validación internas cruzadas y se adquirieron el error cuadrático medio (RMSE), el error absoluto medio (MAE) y el R2, en cada caso. Los resultados obtenidos arrojaron valores de R2 cercanos a 1 y a su vez, se encontraron valores bajos de RMSE y MAE. Por último, para explorar la capacidad de detección de LIBS se calcularon el límite de detección (LoD) y el límite de cuantificación (LoQ) en cada caso. Los LoD encontrados fueron más bajos que los reportados en la bibliografía con la misma técnica. De esta forma, se propuso la incorporación de una nueva metodología analítica, alcanzando LoD relativamente bajos para la detección de residuos de plaguicidas en alimentos, que conlleva a un avance en el análisis de la calidad de los mismos. Todo esto mediante un análisis óptico que involucra registros a distancia, mínima destrucción de muestras que posibilitan registros posteriores y la extensión de la implementación de la técnica si el efecto matriz lo permite. Estos hallazgos podrían ser utilizados como una técnica preliminar o complementaria a las ya existentes.

Estudio de adsorción de monocapas auto-ensambladas de L-cisteína y L-triptófano sobre superficie monocristalina de Au(111) mediante microscopía túnel de barrido y métodos ab-initio

• Vanina G. Franco,[1,2] Sindy J. Rodríguez Sotelo,[1,2] Florencia C. Calaza,[3] Gustavo Ruano-Sandoval,[4] Mario C.G. Passeggi (h)[1,2]

[1] *Instituto de Física del Litoral - Guemes 3450, Santa Fe*
[2] *Dpto. de Física, Facultad de Ingeniería química, UNL, Santa Fe*
[3] *Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química, CONICET-UNL*
[4] *Centro Atómico Bariloche (CNEA) Bariloche*

Introducción. El desarrollo y la optimización de dispositivos a escala nanométrica, demandan una exhaustiva comprensión del proceso de autoensamblado de las moléculas y de las propiedades químicas y físicas de la interfase orgánica/inorgánica generada. La formación de monocapas autoensambladas (SAMs) por autoorganización, es una de las técnicas más empleadas para modificar superficies. En particular en el área de nanobiosensores, las SAMs son un valioso nexo entre el conductor metálico encargado de transducir señales y las moléculas biológicas que sirven como elementos de reconocimiento. Las SAMs de aminoácidos, han recibido especial atención, debido a la posibilidad de abordar mediante un sistema relativamente simple, desafíos de mayor complejidad [1]. Por lo tanto, es fundamental la comprensión de las propiedades químicas y físicas de la interfase y del proceso de formación de éstas SAMs en particular. Los aminoácidos L-cisteína (Cys) y L-triptófano (Trp) merecen un interés particular como enlazantes de macromoléculas para sensores biológicos, debido a los grupos R que presentan. En este trabajo se realizó un estudio teórico y experimental de la formación de SAMs de moléculas de Cys y de Trp en solución, sobre superficies monocristalinas de Au(111). La adsorción de moléculas se llevó a cabo por inmersión del sustrato (dipping) en soluciones metanólicas de Cys y de Trp a diferentes cubrimientos y se caracterizaron las SAMs mediante microscopia túnel de barrido (STM) en aire y a temperatura ambiente. Adicionalmente, con cálculos ab-initio mediante la teoría del funcional de la densidad (DFT) se estudió la interacción sustrato-adsorbato en tres sistemas: (i) Cys sobre Au(111), (ii) Trp sobre Au(111) y (iii) Metanol sobre Au(111).
Resultados. Se obtuvieron imágenes de STM, en las cuales se observó que las moléculas de Cys y Trp se autoorganizan siguiendo la geometría del sustrato, alrededor de "dark spots" de unos pocos nanómetros [2], por lo que presentan un patrón de cadenas que forman un laberinto [3] con estructura orientada en las tres direcciones. Los cálculos llevados a cabo, mostraron que para Cys se genera un proceso de quimisorción sobre Au(111) y se debe a la interacción entre el grupo tiol y los átomos superficiales de oro que forman una unión covalente. En cambio, para Trp este proceso es de fisisorción a través del grupo indol. En ambos casos, los aminoácidos desplazaron el solvente (metanol) de la superficie que se encontraba fisisorbido, para formar las SAMs correspondientes. Esto permitió que las moléculas se ubiquen ordenadamente, a través del grupo R que genera la interacción.
Conclusiones. Se examinó la estructura molecular, el orden y la reconstrucción que induce el proceso de adsorción de Cys y Trp en la superficie monocristalina de Au(111). Según Cavalleri, la formación de éstos "dark spots" se debe a la deposición de organosulfurados, pero hemos evidenciado que esto ocurre también con otro aminoácido, como es triptófano. Por otra parte, la determinación de las configuraciones de equilibrio, energías y distancias de adsorción, densidades de estado y transferencia de carga entre el sustrato y las moléculas, evidenció la diferencia en la naturaleza de las uniones de la interfase para cada aminoácido, lo que da a cada superficie funcionalizada, propiedades singulares y de potencial aplicación.

Referencias:

[1] Uvdal, J. Colloid Interface Sci. **149**, 162 (1992).
[2] Cavalleri, Trends in Physical Chemistry, **14**, 1 (2010).

[3] Yitamben, Nanotechnology, **26**, 235604 (2015).

Los tiempos más cortos alguna vez medidos

Sebastián López,[1] • Diego Arbó[1,2]

[1] *Instituto de Astronomía y Física del Espacio, CONICET- UBA, Buenos Aires, Argentina*
[2] *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Ciclo Básico Común - Universidad de Buenos Aires*

La Relatividad General junto a observaciones astronómicas nos dice que la edad del Universo es de aproximadamente un trillón de veces más grande que lo que el corazón humano tarda entre contracción y relajación para el bombeo de la sangre. Ahora, el período del latido del corazón de un ser humano es a su vez un poco menos de un trillón de veces más grande que el período de revolución de un electrón en un átomo de hidrógeno,. La trillonésima de segundo o attosegundo es el tiempo característico de las transiciones atómicas y moleculares. La pregunta del millón (en este caso del trillón) es: ¿Se pueden medir estos tiempos?
Como sabemos, la mecánica clásica no es adecuada para tratar los fenómenos ultrarrápidos que se dan en el micromundo (¿o debería decir attomundo?), por lo que debemos utilizar la mecánica cuántica. Sin embargo, como el tiempo no es un operador autoadjunto, tampoco es un observable para la mecánica cuántica. ¿Y entonces?
En este trabajo vamos a mostrar cómo hoy en día se puede acceder experimentalmente a través de la tecnología de los láseres a los tiempos más cortos jamás medidos y echar luz (láser, por supuesto) a preguntas simples pero de enorme dificultad teórica y tecnológica como: ¿Es la ionización un proceso instantáneo o hay un tiempo de retardo finito? ¿Cuánto tarda el efecto túnel? Mejor terminar este resumen con buenas preguntas que con respuestas inciertas.

Procesos Multifotónicos en He

• Diego Boll,[1] Lara Martini,[1] Alicia Palacios,[2,3] Omar Fojón[1,4]

[1] *Instituto de Física de Rosario, CONICET-UNR*
[2] *Institute of Advance Research in Chemical Science (IAdChem), UAM*
[3] *Depto. de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid*
[4] *Escuela de Ciencias Exactas y Naturales, FCEIA-UNR*

El interés en los procesos multifotónicos ha experimentado un resurgimiento en el siglo actual con el desarrollo de pulsos de femtosegundos y subfemtosegundos, cuyas frecuencias centrales se encuentran en el rango UV/EUV. En su versión actual, los Láseres de Electrones Libres (FELs) son capaces de proporcionar las intensidades necesarias para la observación de transiciones multifotónicas, no solo entre estados ligados, sino también entre estados ligados y del continuo. Además, la alta resolución espectral lograda por los FELs, junto con una sintonización fina en frecuencia y estado de polarización de la luz, permite explorar nuevos esquemas de control que combinan campos de dos colores [1, 2, 3]. Basándonos en el estado experimental actual, analizamos en primer lugar las distribuciones angulares para la ionización simple de He mediante dos fotones de igual frecuencia, en el caso de un pulso EUV ultracorto. Estas distribuciones angulares, obtenidas al resolver numéricamente la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (TDSE) en dimensión completa, revelan los mecanismos dominantes los cuales dependen de la energía total absorbida y los parámetros del pulso. Al explorar las contribuciones de los términos de correlación electrónica radial y angular, encontramos que la descripción del sistema mediante un solo electrón activo es un enfoque cualitativamente válido para las energías de fotones más bajas, incluso en la región por encima del umbral de ionización. No obstante, la correlación angular juega un papel detectable en la región de baja energía y un papel importante en energías más altas cuando los estados autoionizantes pueden ser poblados. En particular, cuando los estados doblemente excitados están poblados, mostramos que al seleccionar fotoelectrones con diferentes energías (cercanas entre sí) es posible obtener distribuciones angulares radicalmente diferentes, ofreciendo de esa forma los medios para lograr un control sobre la contribución relativa de los canales de fotoionización permitidos [4]. Un enfoque conceptualmente diferente para manipular las contribuciones relativas de los canales de fotoionización con diferentes momentos angulares es el control de polarización. En este esquema de dos colores, la ionización de fotón único (*pump*) de blancos atómicos y moleculares por pulsos en la región EUV, da lugar a una distribución de fotoelectrones en el continuo. El intercambio adicional de fotones con un láser en el infrarrojo (IR, *probe*) genera una secuencia de picos de fotoelectrones secundarios denominadas *sidebands*. Resultados experimentales previos capturaron una modulación en la señal de estos *sidebands* cuando se modifica el ángulo de polarización relativo entre los campos láseres [5]. En nuestro caso, mediante la teoría de perturbaciones de segundo orden demostramos que es posible lograr un mayor grado de control sobre la señal de las *sidebands* cuando la energía del fotón EUV se encuentra por debajo del umbral de ionización. Esta región energética, en gran parte inexplorada, ofrece posibilidades únicas para lograr el control de polarización de la reacción [6].
Finalmente, al considerar trenes de pulsos de attosegundos en presencia de un campo laser infrarrojo se obtiene un esquema tipo RABBITT (*Reconstruction of Attosecond Beating By Two-photon Transitions*). En este caso, mostramos que un modelo analítico sencillo [7] no perturbativo, es capaz de describir cuantitativamente las distribuciones angulares obtenidas mediante la resolucion de la TDSE, incluso para el caso donde se tienen transiciones multifotónicas continuo-continuo.

Referencias:

[1] Meyer M, *et al.*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. B **43**, 194006 (2010).
[2] Prince KC, *et al.*, Nat. Photon. **10**, 176 (2016).
[3] Giannessi L, *et al.*, Sci. Rep. **8**, 7774 (2018).
[4] Boll DIR, *et al.*, Phys. Rev. A **99**, 023416 (2019).

[5] Meyer M, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **101**, 193002 (2008).
[6] Boll DIR, *et al.*, Phys. Rev. A **101**, 013428 (2020).
[7] Boll DIR, and Fojón OA J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **49**, 185601 (2016).

Poder de frenado de los electrones libres y ligados de un plasma parcialmente ionizado utilizando el formalismo dieléctrico

• Manuel D. Barriga-Carrasco,[1,2] Francisco Chacón-Rubio,[1] Claudia C. Montanari[2]

[1] *E.T.S.I. Industrial, Universidad de Castilla-La Mancha, E-13071 Ciudad Real, España.*
[2] *Instituto de Astronomía y Física del Espacio, CONICET- UBA, Buenos Aires, Argentina*

En este trabajo, se propone un nuevo modelo teórico que considera el poder de frenado de electrones libres y ligados de un plasma parcialmente ionizado. Para formular este modelo, se utiliza el conocido formalismo dieléctrico, combinando una función dieléctrica de plasmas cuánticos para electrones libres, y la Shellwise Local Plasma Approximation (SLPA) para electrones ligados. Dado que hay pocos datos experimentales disponibles para plasmas, nuestros cálculos a $T = 0$ en sólidos se comparan con el código SRIM. El ajuste con los datos experimentales es excelente. Luego, se ha considerado un gas frío en diferentes estados de ionización; los resultados muestran un comportamiento muy bueno, pero con una cierta sobreestimación del pico de frenado y una cierta subestimación en la región de baja energía. Finalmente, se comparan nuestros cálculos en plasmas en diversas condiciones de ionización con otros modelos de la bibliografía que también consideran electrones ligados, concretamente: el modelo de Mehlhorn y el modelo de Zimmerman. En general, se obtienen muy buenos ajustes. Las pequeñas diferencias observadas pueden explicarse por el rango de aplicación de los otros modelos considerados. De acuerdo con los resultados obtenidos, el SLPA da la mejor descripción de la contribución de los electrones ligados al poder de frenado de materiales parcialmente ionizados.

Conductividad Térmica en Nanoestructuras

• Geraudys Mora Barzaga,[1,2] Eduardo Bringa[1]

[1] *CONICET*
[2] *Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales. Universidad Nacional de San Luis.*

Las propiedades a la nanoescala de los materiales pueden tener una gran influencia en su comportamiento macroscópico, por ejemplo, la generación y acumulación de defectos, como la densidad, la porosidad y las interfaces, pueden cambiar sus propiedades térmicas. En este trabajo, utilizamos simulaciones de dinámica molecular (MD), como una herramienta para estudiar el transporte térmico por vibraciones en presencia de estos defectos. Para determinar la influencia de una interface en la conductividad térmica, consideramos dos nanopartículas cristalinas sin presión externa, sometidas a un gradiente de temperatura perpendicular a la superficie de contacto entre ellas, y determinamos la conductividad térmica, la resistencia de contacto y el radio de contacto (ac) en función al radio de las nanopartículas (R). La resistencia de contacto en la interfaz aumenta linealmente con el radio de contacto entre las nanopartículas, lo que lleva a una disminución neta en la conductividad efectiva a medida que aumenta el tamaño de las nanopartículas. Un modelo basado en el radio de contacto entre dos nanopartículas permite explicar razonablemente los resultados numéricos obtenidos para la conductividad térmica, bien descrita por una dependencia con (ac/R). Se encontró que la conductancia térmica simulada es proporcional a (ac/R) [1].
También hemos estudiado otros nanosistemas de interés tecnológico: nanocables (NWs) y nanotubos (NTs) de carbono amorfo (aC). Para estudiar la influencia de la densidad, la temperatura y la geometría en las propiedades térmicas, obtenemos y analizamos la conductividad térmica de NW y NT con un radio externo de 2 nm, utilizando el Environment-Dependent Interaction Potential (EDIP), revisado para aC. El comportamiento de la conductividad térmica con radios internos, temperatura y densidad (relacionado con diferentes niveles de hibridación sp3) se compara con experimentos en películas delgadas, encontrando muy buen acuerdo. Para los NTs, se obtuvo un aumento en la conductividad a medida que se aumenta el radio interno, disminuyendo el grosor de la pared.

Referencias:

[1] Mora-Barzaga, G., Miranda, E. N., Bringa, E.M., *Molecular dynamics simulations of thermal conductivity between two nanoparticles in contact*, J. App. Phys. **127**, 224303 (2020). DOI

Dispersiones Inelasticas de Partículas Cargadas en Aluminio: Tratamiento Dieléctrico

• Jesica Paola Peralta,[1,2] Marcelo Fiori,[1] Claudia Montanari[2]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas - Universidad Nacional de Salta*
[2] *Instituto de Astronomía y Física del Espacio, CONICET- UBA, Buenos Aires, Argentina*

El objetivo de este trabajo es analizar la función dieléctrica de los metales para obtener la pérdida de energía que sufre una partícula cargada al atravesar un material en colisiones inelásticas con los electrones del mismo. Este estudio es de gran interés para obtener las distintas magnitudes relacionadas a este fenómeno, tales como secciones eficaces de ionización o pérdida de energía del ion por unidad de camino (o stopping power), entre otras. Tomamos como punto de partida para este análisis el caso del aluminio, ya que es uno de los metales con mayor aplicación y mayor número de mediciones experimentales. Al ser un metal se debe tener en cuenta que debemos tratar por un lado los electrones de las capas internas y por otro lado los electrones de la capa de valencia o conducción, que constituyen el gas de electrones libres (FEG). A lo largo del trabajo nos basamos en el formalismo dieléctrico cuántico [1- 2], estudiando distintos modelos para la función dieléctrica: Lindhard [1], Mermin [3], Levine [4], entre otros. Desarrollamos códigos para obtener la perdida de energía para dichos modelos en función de la energía y el momento transmitido a los electrones del blanco, y estudiando los diferentes rangos de energía y validez. También hicimos comparación con datos experimentales [5] y semi-empíricos [6], los cuales nos permitieron realizar distintos análisis de los resultados obtenidos teóricamente y analizar temas relevantes tales como un modelo que contemple apantallamiento intra e inter bandas (electrones de la misma capa y entre capas), las excitaciones colectivas (plasmones) de electrones de capas internas, y otras características a tener en cuenta cuando tratamos con un blanco sólido. A partir de este trabajo, tenemos varias perspectivas a futuro. La primera es evaluar pérdida de energía total en distintos blancos y cuanto influyen los distintos modelos presentados, así como el estudio de los electrones en capas internas (K y L) del aluminio y otros metales de interés.

Referencias:

[1] G.Grosso, and G. Paravicini, Solid State Physics, Academic Press (2014).
[2] C. Montanari, and J. Miraglia, Adv. Quan. Chem. **65**, 165 (2013).
[3] N. Mermin, Phys. Rev. B **25**, 2362 (1970).
[4] Z. Levine, and S. Louie, Phys. Rev. B **25**, 6310 (1982).
[5] E. Shiles, T. Sasaki, M. Inokuti, and D. Smith, Phys.Rev.B **22**, 1612 (1980).
[6] J. McMahon, G. Schatz, and S. Gray, Phys.Chem. Chem.Phys **15**, 5415 (2013).

Modelos teóricos de onda distorsionada orientados a radioterapia vectorizada

• Nicolás Julián Esponda,[1] Juan Manuel Monti,[1,2] Roberto Daniel Rivarola[1,2]

[1] *Laboratorio de Colisiones Atómicas, Instituto de Física Rosario (CONICET-UNR)*
[2] *Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura - Universidad Nacional de Rosario*

El estudio de la interacción de haces de partículas cargadas con la materia ha sido de creciente interés a lo largo del tiempo debido a sus múltiples áreas de aplicación como la astrofísica, física del plasma o radiobiología. En esta última, la comprensión de procesos de ionización y captura electrónica en colisiones entre iones y moléculas del medio biológico (por ejemplo agua o bases de ADN) ha posibilitado, en conjunto con otras áreas del conocimiento, el desarrollo de nuevas técnicas en Radioterapia. Entre ellas, la adioterapia Vectorizada está ganando gran interés por haber demostrado ser una efectiva opción como terapia de consolidación o bien como tratamiento temprano para pacientes metastásicos [1,2].

La Radioterapia Vectorizada utiliza fármacos radiomarcados para suministrar precisas dosis de radiación ionizante que concentren el daño solo en cierto grupo de células objetivos. En consecuencia, la búsqueda de radioisótopos candidatos para la elaboración de dichos radiofármacos comprende el estudio de la dosis que puedan suministrar. Hoy en día, mediante códigos computacionales de tipo Monte Carlo, se logran simular un gran número de interacciones desencadenadas en un medio biológico [3,4]. Esto implica disponer de una inmensa base de datos de secciones eficaces para reacciones de ionización y captura. En este contexto, la elaboración de modelos teóricos que describan correctamente los fenómenos físicos a la vez que preserven expresiones analíticas resultan de gran utilidad e interés.

En este trabajo se presenta el modelo de onda distorsionada del continuo con estado inicial eikonal (CDW-EIS) [5-8] para el cálculo de secciones eficaces en reacciones de ionización simple de sistemas de colisión entre iones o átomos contra blancos atómicos o moleculares. En colisiones donde el proyectil tiene electrones ligados, su carga nuclear puede verse total o parcialmente apantallada. Para grandes parámetros de impacto, las distorsiones debidas al proyectil presentan una carga asintótica, mientras que para cortos parámetros de impacto el apantallamiento de la carga nuclear podría resultar parcial o nulo. Entonces, mediante el factor de forma del proyectil [9] se define una carga efectiva dinámica que contempla, en cada caso, el correspondiente grado de apantallamiento.

Referencias:

[1] Liersch T. *et al.*, J. of Clin. Oncol. **23**, no. 27, 6763 (2005).
[2] Morschhauser F. *et al.*, J. of Clin. Oncol. **26**, no. 32, 5156 (2008).
[3] Champion C. *et al.*, Radiat. Res. **163**, 222 (2005).
[4] Quinto M.A. *et al.*, J. Phys.: Conf. Ser. **583**, 012049 (2015).
[5] Belkić D., J. Phys. B **11**, 3529 (1978).
[6] Crothers D.S.F and McCann J.F., J. Phys. B **16**, 3229 (1983).
[7] Fainstein P.D., J. Phys. B **24**, 3091 (1991).
[8] Monti J.M. *et al.*, Atoms **9**, 3 (2021).
[9] Dubois, R.D. and Manson S.T., Phys. Rev. A **42**, 1222 (1990).

Modelo unificado de paquete de onda para pérdida de energía de partículas en blancos fríos y calientes

• Claudio Archubi,[1] Nestor Arista[2]

[1] *Instituto de Astronomía y Física del Espacio, CONICET- UBA, Buenos Aires, Argentina*
[2] *Centro Atomico Bariloche - Comisión Nacional de Energía Atómica*

Proponemos un modelo unificado -UWPM- para evaluar procesos de interacción electrónica de partículas cargadas con la materia condensada caliente, incluyendo pérdida de energía, camino libre medio, straggling y rangos de termalización de iones desnudos y partículas más livianas tales como positrones y electrones. Formulamos nuestro método introduciendo modificaciones al método del modelo de paquete de onda extendido para haces de protones. Este modelo fue propuesto en su forma inicial -WPM- para stopping de protones incidentes en blancos fríos en una serie de papers por T. Kaneko [1-3], y fue modificado recientemente por nosotros en otra serie de papers introduciendo primero el efecto del gap de energía -EWPM- [4-5] y posteriormente los efectos de la temperatura en el stopping -UWPM-[6] y más recientemente, modificaciones cuánticas específicas para el resto de los momentos y para incluir los casos de positrones y electrones en blancos calientes. El punto de partida es la aproximación por paquetes de onda gaussianos de los estados electrónicos del blanco, teniendo en cuenta el gap de energía y el estado de ionización en el caso de orbitales ligados, y el aumento de la densidad electrónica en el caso del gas caliente de electrones libres como consecuencia de la ionización. Se deduce una función dieléctrica específica, en cada uno de estos dos casos, para dichos paquetes. En caso de blancos fríos, dicha deducción resulta de aplicar el método de Levine y Louie [7-8] a la función dieléctrica deducida por Kaneko mediante teoría cuántica de perturbaciones de segundo orden en el modelo WPM. En el caso de blancos calientes, se introducen modificaciones heurísticas que incorporan los efectos de la ionización y de la temperatura comparando nuestro modelo con el modelo de Arista-Brandt [9]. Nuestro modelo permite describir y evaluar los efectos de la ionización y los cambios en la temperatura y en la densidad del blanco. La ionización del blanco conduce a la formación de un plasma denso y caliente alrededor con propiedades de absorción de energía específicas. Usamos nuestro método unificado para evaluar las contribuciones de los orbitales internos y de los electrones libres producidos por la ionización a la pérdida de energía de protones en Si, C y Fe en un extenso rango de energías con densidades y temperaturas que van desde condiciones normales de laboratorio hasta muy altos valores, tales como aquellos de interés para la fusión nuclear y en estudios de astrofísica.

Referencias:

[1] T. Kaneko, *Wave packet theory of bond electrons*, Phys. Rev. A **40**, 2188 (1989).
[2] T. Kaneko, *Partial and total electronic stoppings of solids and atoms for energetic ions*, Phys. Status Solidi B **156**, 49 (1989).
[3] T. Kaneko, *Partial and total electronic stopping cross sections of atoms and solids for protons*, At. Data Nucl. Data Tables **53**, 271 (1993).
[4] C. D. Archubi and N. R. Arista, *Extended wave-packet model to calculate energy-loss moments of protons in matter*, Phys. Rev. A **96**, 062701 (2017).
[5] C. D. Archubi and N. R. Arista, *Studies of threshold effects in the interaction of protons, electrons and positrons in matter using dielectric models, in Rufus Ritchie, A Gentleman and A Scholar, Advances in Quantum Chemistry*, edited by J. Sabin and J. Oddershede (Academic Press, New York, 2019), Vol. **80**, Chap. 10, pp. 247–269.
[6] C. D. Archubi and N. R. Arista, *Unified description in the interaction and energy loss of particles with dense matter and plasmas*, Phys. Rev. A **102**, 052811 (2020).
[7] Z. H. Levine and S. G. Louie, *New model dielectric function and exchange-correlation potential for semiconductors and insulators*, Phys. Rev. B **25**, 6310 (1982).

[8] C. C. Montanari and J. E. Miraglia, *The dielectric formalism for inelastic processes in high-energy ion-matter collisions*, Adv. Quantum Chem. **65**, 165 (2013).
[9] N. R. Arista and W. Brandt, *Dielectric response of quantum plasmas in thermal equilibrium*, Phys. Rev. A **29**, 1471 (1984).

Dinámica de la colisión e^- - $NeHe^+$ en un modelo 1D

• Federico M. Pont[1,2]

[1] *Instituto de Física Enrique Gaviola (IFEG) - CONICET, Córdoba, Argentina.*
[2] *Universidad Nacional de Córdoba, Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación, Córdoba, Argentina*

Se estudió la probabilidad de observar captura y emisión electrónica por interacción Coulombiana (ICEC) en una colisión electrónica con el ión $NeHe^+$. Se construyó un modelo unidimensional para el ión en el cual se computó la dinámica cuántica de la colisión con el electrón. Primeramente se construyeron modelos unidimensionales para simular los estados fundamentales de los átomos de Neón y Helio, incluyendo un electrón activo y un potencial efectivo para el núcleo y los electrones restantes. Los parámetros del potencial fueron ajustados teniendo en cuenta propiedades físicas de los estados a simular y la primera energía de ionización del Neon y el Helio. Luego se calculó la energía de un electrón en la presencia de ambos núcleos como función de la distancia entre núcleos R (aproximación de núcleos fijos). Se determinaron curvas de energía potencial (PEC's) para analizar la posición de equilibrio de los núcleos R_{eq}, en el estado fundamental y primer excitado. Utilizando el estado en la configuración de equilibrio, se encontró la energía del estado fundamental y primer excitado utilizando un modelo que incluye a la distancia R como variable dinámica. Estos estados son los utilizados como estados iniciales en el proceso de colisión con el electrón incidente. El análisis de la densidad electrónica absorbida en los bordes de la grilla de simulación se utilizan para determinar la probabilidad de ICEC y otros procesos posibles. Asimismo se analizaron las evoluciones dinámicas de las poblaciones de los estados de $NeHe^+$.

Resistencia a la radiación en nanopartículas metálicas de tipo core-shell

• Diego R. Tramontina,[1,2] Orlando R. Deluigi,[1,2] Reinhardt Pinzón,[3,4,5,6] Javier Rojas-Nuñez,[7,8,9] Felipe J. Valencia,[8] Samuel E. Baltazar,[7,8,9] Rafael I. Gonzalez,[7,10] Eduardo M. Bringa[1,2,10]

[1] *Facultad de Ingeniería - Universidad de Mendoza*
[2] *CONICET*
[3] *Centro de Estudios Multidisciplinarios de Ingeniería Ciencias y Tecnología, El Dorado, República de Panamá.*
[4] *Grupo CIHH del HPC-Cluster-Iberogun, República de Panamá*
[5] *Sistema Nacional de Investigación, República de Panamá*
[6] *Universidad Tecnológica de Panamá - Centro de Investigaciones Hidráulicas e Hidrotécnicas*
[7] *Centro para el Desarrollo de la Nanociencia y la Nanotecnología, Universidad de Santiago de Chile, Chile.*
[8] *Centro de Investigación DAiTA Lab, Facultad de Estudios Interdisciplinarios, Universidad Mayor, Chile*
[9] *Universidad de Santiago de Chile, Santiago, Chile*
[10] *Centro de Nanotecnología Aplicada, Facultad de Ciencias, Universidad Mayor, Santiago, Chile 8580745*

Presentamos simulaciones de dinámica molecular (molecular dynamics, MD) sobre daño por radiación en nanopartículas bimetálicas tipo Core-Shell (CSNP). La CSNP incluye un núcleo de Fe (bcc), recubierto con una capa de Cu (fcc) y se emplea una nanopartícula (NP) de Fe puro para contraste. Se emplearon varias energías de hasta 10 keV utilizando el método Primary Knock-on Atom (PKA). Los resultados muestran defectos puntuales, sin formación de clusters más allá de di-vacancias, a diferencia de lo observado en materiales 'bulk'. Las simulaciones de bombardeo acumulativo con PKAs de 5 keV muestran el mismo comportamiento, también con menos defectos que en el caso bulk. La interfaz core-shell y el shell pueden actuar como sumideros de defectos, absorbiendo el daño inducido por radiación y por lo tanto, el número final de defectos en el núcleo es significativamente menor que en el caso NP. Además, la capa de Cu disminuye sustancialmente el número de átomos eyectados de Fe, actuando como una barrera. Estructuralmente, el shell de Cu responde a la tensión generada por las cascadas de colisión mediante acumulación de defectos puntuales minimizando el daño en el núcleo. Comparamos nuestros resultados de MD con simulaciones de Monte Carlo usando el método de Aproximación por Colisiones Binarias (Binary Collision Approximation, BCA) implementado en SRIM, para la irradiación de una película delgada amorfa tricapa con un espesor análogo al diámetro de la CSNP y una de tipo monocapa, emulando la NP. BCA no modela la recombinación de defectos, por lo que el número de pares de Frenkel es significativamente mayor al observado con técnicas MD, como es de esperarse. BCA también subestima el sputtering, lo que también se espera dado que se ha simulado radiación con incidencia normal. De acuerdo con nuestras simulaciones, esta clase de nanomaterial podría ser adecuada para desarrollar nuevos recubrimientos resistentes a la radiación, componentes nanoestructurados y escudos para su uso en entornos extremos, por ejemplo, en aplicaciones de energía nuclear, astrofísica y radiomedicina.

Predicción de estructuras cristalinas de interés farmacológico mediante algoritmos genéticos. Desarrollo de un nuevo código que utiliza eficientemente los recursos de la Open Science Grid (OSG)

• Kristal N. Varela ,[1] Gabriel I. Pagola ,[1] Marta B. Ferraro,[1] Albert M. Lund ,[2] Anita M. Orendt,[3] Julio C. Facelli [2]

[1] *Depto. Física, FCEyN (UBA) - IFIBA - CONICET*
[2] *Department of Biomedical Informatics, University of Utah, Salt Lake City, US*
[3] *Center for High Performance Computing, University of Utah, Salt Lake City, US*

Desde hace casi dos décadas nuestro grupo trabaja en la predicción de estructuras de cristales moleculares de interés farmacológico mediante el desarrollo de un código propio basado en algoritmos genéticos, denominado Modified Genetic Algorithms for Crystals (MGAC). Actualmente estamos desarrollando una nueva versión del código, donde las optimizaciones locales de las estructuras candidatas se realizan a nivel Density Functional Theory (DFT) empleando el código Quantum Espresso (QE) [1]. Dado que estos cálculos insumen mucho tiempo de cómputo, estos se realizan de manera asincrónica empleando los recursos provistos la Open Science Grid (OSG) [2]. El programa principal del MGAC corre en un servidor y se encarga de ir enviando las optimizaciones a efectuar a la OSG y de mantener una lista actualizada de los cristales candidato con menor energía (mejores candidatos). Al finalizar cada optimización se envía la salida de QE al servidor donde corre el código maestro (MGAC) que se encarga de procesarla y evaluar si corresponde descartar el candidato optimizado o incorporarlo a la lista de mejores cristales. Por otra parte, el MGAC se encarga de construir periódicamente una segunda lista con un conjunto de cristales hijos, generados a partir de la recombinación de elementos de la lista de mejores cristales (padres). Los cristales de la segunda lista son los candidatos disponibles, listos para ser distribuidos en forma asincrónica a medida que lo permitan los recursos disponibles en la OSG. En este trabajo se analizan las características de esta nueva implementación y se presenta un conjunto de resultados preliminares empleando como sistema molecular de testeo el metanol. Se ha elegido este sistema por ser un sistema pequeño y que es de interés en la bibliografía [3].

Referencias:

[1] www.quantum-espresso.org
[2] www.opensciencegrid.org
[3] Tzu-Jen Lin *et al.*, Phys. Chem. Chem. Phys. **18**, 2736 (2016).

El Ventilador argentino Geii Vítae

• Cristián Antiba[1]

[1] *Grupo de Experimentación Innovativa e Instrumental - UNR*

El Ventilador Geii Vítae es un dispositivo de ventilación mecánica que trabaja en modo ventilatorio controlado por presión (PCV), permitiendo trabajar en dos tipos de respiración:
-Respiración Controlada: todas las variables de fase son llevadas a cabo por el ventilador. Modo PCV.
-Respiración Asistida: el paciente puede iniciar la respiración, pero las variables de límite y ciclado se controlan por el ventilador. Modo aPCV,
-Respiración Soportada: las variables de inicio se llevan a cabo por el paciente, la variable de control y ciclado son llevadas a cabo por el ventilador. Modo VMNI.
El sistema neumático es controlado por un PLC de seteo táctil con visualización. Está integrado por un sistema de válvulas mezcladoras de oxígeno y aire, la válvula espiratoria, la válvula de alivio, el sensor de presión y el sistema de cálculo de volumen entregado por el ventilador. El ventilador controla los flujos de aire y oxígeno a través de válvulas distintas. La mezcla de FiO2 puede ser controlada mediante el accionamiento de una válvula manual, cuyo control se encuentra en la parte frontal del ventilador. La conexión a la red de aire comprimido y oxígeno son realizadas al sistema neumático a través de los conectores disponibles en la parte posterior del ventilador. El ventilador también cuenta con un generador de aire independiente o compresor, ubicado en la parte inferior. El mismo actúa cuando se detecta la falla del suministro de aire desde la red. El sensor de presión está ubicado a la salida del circuito del ventilador y mide la presión absoluta del sistema. Previo al sensor antes mencionado se encuentra el sistema que permite calcular el volumen entregado por el ventilador. El valor del volumen es obtenido a partir de la medición de presión al pasar el gas por este sistema, utilizando estos datos para el cálculo. En el ramal de conexión al paciente se conecta una válvula de alivio que actúa como seguridad para el paciente denominda Pop Off.

Aplicación de clasificadores en la detección de patologías en señales electrofisiologicas de potenciales evocados

• Juan Luis Barberia,[1,2] Yanina Corsaro,[1,2] Lorenzo Licata Caruso,[1,2] Marco Gabriel Baldiviezo,[1,2] Juan Facundo Fernandez Biancardi,[1,2] Masia Rebeca Hernando,[1,2] Camila Bontempo,[1,2] Adrian Paglia,[1,2] Matias Rodriguez,[1,2] Walter Legnani[1,2]

[1] *Centro de Procesamiento de Señales e Imágenes*
[2] *Facultad Regional Buenos Aires. Universidad Tecnologica Nacional*

El objetivo de este trabajo fue evaluar la performance de tres algoritmos de clasificación automática de señales: Random Forest, Support Vector Machines y Nearest Neighbor [1] para distinguir señales de potenciales evocados de individuos normoyentes y patológicos.
Para esto se construyó un dataset compuesto por mediciones provenientes de señales de potenciales auditivos evocados de corta latencia extraídas del banco de datos de Physionet [2]. La señal estímulo del estudio consistió en tonos de diferente intensidad y diferente frecuencia. Se tomaron las señales en su formato original en bruto, de las cuales 500 corresponden a pacientes normoyentes y 500 a patológicos. Las señales fueron procesadas para incorporarlas al dataset mediante un denoising constituido por onditas en base a umbrales, tomando los primeros 5000 puntos de cada señal. Se subdividió el dataset por bandas de frecuencia del estímulo: 1 kHz y 4 kHz, y de intensidad sonora: 10 dB a 40 dB, 40 dB a 60 dB y 60 dB a 100 dB.
Con el objetivo de disminuir el sobreajuste y validar, se utilizó un 80% para el modelado con los diferentes algoritmos y un 20% para validación. A través de diferentes magnitudes correspondientes a sistemas dinámicos no lineales, como los exponentes de Lyapunov a través de una adaptación del algoritmo de Wolf [3], la Dimensión Fractal a través del algoritmo de Higuchi [4] y a través del cálculo de la Entropía de Permutación [5], Entropía de Permutación Ponderada [6] y Modificada [7] se calcularon las diferentes variables que constituyeron el dataset. Para el cálculo de la función de distribución de las entropías se utilizó una dimensión de embedding de 3 y 4, y un time delay de 15 y 20, siendo este el rango de valores habituales que se utiliza en la literatura de física médica, obteniéndose con estos los mejores resultados para este tipo de señales.
La performance del clasificador se ponderó mediante la elaboración de las curvas características operativas del receptor (en inglés ROC) [8]. A partir de esto se calculó el porcentaje de aciertos en la predicción del modelo, el área bajo la curva ROC, la sensibilidad, la especificidad y la precisión.
Los tres clasificadores empleados mostraron una elevada performance en el trabajo, resultando para algunas combinaciones del dataset mejores el Random Forest y el Support Vector Machines.

Referencias:

[1] Aggarwal, CH, *DataClassification Algorithms and Applications*, (2015).
[2] Physionet Consultado 17/07/2021.
[3] Alan Wolf, Jack B. Swift, Harry L. Swinney, and John A. Vastano, *Determining Lyapunov exponents from a time series*, Department of Physics, University of Texas, Austin, USA, (1984).
[4] T. Higuchi, *Approach to an irregular time series on the basis of the fractal theory*, Phys. D **31**, 277 (1987).
[5] C. Bandt and B. Pompe, *Permutation Entropy: A Natural Complexity Measure for Time Series*, Phys. Rev. Lett. **88**, 174102 (2002).
[6] B. Fadlallah, B. Chen, A. Keil, and J. Príncipe, *Weighted-permutation entropy: A complexity measure for time series incorporating amplitude information*,Phys. Rev. E **87**, 022911 (2013).
[7] Cuesta-Frau, D. *Using the Information Provided by Forbidden Ordinal Patterns in Permutation Entropy to Reinforce Time Series Discrimination Capabilities*, Entropy **22**, 494 (2020).
[8] Wojtek J. Krzanowski, *ROC Curves for Continuous Data*, CRC Press (2009).

Crecimiento tumoral y su respuesta a inmunoterapias mediante un modelo basado en multiagentes

• Luciana Melina Luque,[1] Carlos Manuel Carlevaro,[1] Enrique Lomba[2]

[1] *Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos, CONICET-UNLP*
[2] *Instituto de Química Física Rocasolano, Consejo Superior de Investigaciones Científicas*

Las inmunoterapias han entrado en auge desde hace unos años por su gran eficacia en la batalla contra ciertos tipos de cáncer. Dicha eficacia no solo radica en las altas tasas de remisión tumoral sino en la reducción de los efectos secundarios con respecto a otros tipos de terapias que dañan las células del tejido sano. Debido a los complejos mecanismos de respuesta inmune y la evasión inmune que presentan ciertas células, estudiar estos sistemas es una tarea desafiante. Además, las distintas escalas temporales que utilizan las funciones del sistema inmunológico genera que el estudio de estos sea muy difícil de lograr en un entorno experimental. Por todo esto, los estudios de modelado computacional han mostrado ser una herramienta poderosa para complementar las mediciones experimentales. Particularmente, el modelo basado en multiagentes es una clase de modelo computacional implementado principalmente para simular las acciones, comportamientos e interacciones de entidades individuales o colectivas autónomas, con el objetivo de explorar el impacto de un agente o de un tipo de comportamiento en el sistema. El conjunto de "reglas simples" que siguen los agentes permite determinar leyes emergentes que surgen del fenómeno colectivo, el cual no puede deducirse en términos de esas reglas simples. Por lo tanto, la ventaja principal de este tipo de modelado es que brinda poder predictivo a gran escala. En otras palabras, permite simular ensayos clínicos con detalles suficientes para estudiar la respuesta a diversas condiciones, por lo que es posible probar y predecir las fallas de las terapias en simulaciones en lugar de hacerlo en los pacientes. Esto no solo podría resultar en un mejor diseño de medicamentos y en la disminución de los costos de su desarrollo, sino en la reducción de riesgos y efectos secundarios, los cuales, en la actualidad, siguen siendo significativos. En esta charla presentaremos algunos resultados preliminares que ilustran cómo un modelo basado en multiagentes puede proporcionar una imagen cuantitativa del crecimiento del cáncer en una variedad de entornos y cómo puede ser limitado por agentes terapéuticos.

Biomecánica y biotensegridad en el modelado articular

Cristhian Fernando Castro Arenas,[1] Cristina Oleari,[2] • Mónica Miralles[1,3]

[1] *Pontificia Universidad Católica Argentina; Facultad de Ingeniería y Ciencias Agrarias; Laboratorio de Biomecánica e Ingeniería para la Salud (LaBIS)*
[2] *Universidad de Buenos Aires - Facultad de Medicina - Catedra de Biomecánica*
[3] *Universidad de Buenos Aires; Facultad de Arquitectura, Diseño y Urbanismo; Centro de Investigación en Diseño Industrial de Productos Complejos*

El término biotensegridad define un área de estudio consagrada a la investigación y al análisis de sistemas orgánicos estructurados, según el principio de tensegridad. Este último es un principio de relación estructural, enunciado por B. Fuller, para sistemas integrados por elementos tensiles que interconectan a todo un conjunto de elementos compresivos. Las configuraciones autoestables resultantes dan lugar a estructuras livianas, flexibles y resistentes, con propiedades emergentes, que siguen siendo profusamente estudiadas. En el campo biológico, el modelo de biotensegridad puede ser utilizado a diferentes escalas. A escala microscópica, para abordar el modelado de la estructura celular e histológica de diferentes componentes del sistema músculoesquelético. A nivel mesoscópico en el análisis de las estructuras anatómicas de las articulaciones sinoviales o unidades biomecánicas aisladas (UBM). A escala macroscópica, posibilita la comprensión de las cadenas biocinemáticas y biocinéticas. Un apartado especial merece la aplicación de la biotensegridad al sistema musculoesquelético, brindando un nuevo mapa del sistema óseo-músculo-ligamentario-fascial, cuyos antecedentes son los trabajos de Myers, Kassolik, Levin, Scarr y Flemons. En los últimos años, los avances en la caracterización del tejido conectivo, relacionado al sistema locomotor -las fascias-, permitieron la aplicación de nuevos modelos de análisis biotenségriles, en estructuras sometidas a tensión, acorde a su anatomía, histología y biomecánica. Este tipo de análisis ha empezado a bioinformar a disciplinas como la robótica o la ingeniería de materiales, ya que requieren para potenciar sus diseños, simulaciones del comportamiento articular y del modelado de tejidos de tensegridad, en diferentes escalas. El presente trabajo expone una revisión bibliográfica actualizada del modelado biotenségril de UBM, junto a desarrollos propios que tienden a lograr mayor precisión anatómica y del comportamiento cinemático y cinético de las articulaciones. Se trata de correlacionar el modelo biotenségril con las articulaciones del cuerpo humano, en la búsqueda de morfologías estables del sistema musculoesquelético, acordes al grado de complejidad morfológico del mismo. La revisión bibliográfica se focalizó en la correspondencia del comportamiento cinemático de las articulaciones del cuerpo humano con el de modelos tensegriles conocidos. Se consultaron bases de datos internacionales (OVID, LILIACS, COCHRANE, PUBMED, Scielo, Dialnet, WorldWideScience, Springer y Google Scholar) y nacionales (INTI, CAICYT-CONICET, IEEE/EEE y OVID del MINCyT) utilizando palabras claves y lógica booleana para el armado de los objetivos de búsqueda en los metabuscadores. Los resultados apuntan, desde la mirada de la biotensegridad de las UBM, a: a) la explicación del movimiento fisiológico; b) la evaluación cinemática normal; c) la comparación de estructuras normales vs. patológicas, d) el modelado de las fases de recuperación/ reparación; e) la prognosis y predicción sobre cómo/cuándo la UBM puede lograr la respuesta fisiológica; f) fundamentar criterios terapéuticos (tratamientos quirúrgicos, maniobras terapéuticas con aplicación de distintas fuerzas).

Estudio de la autofluorescencia de orinas mediante la aplicación de técnicas estadísticas y de análisis multivariado para el diagnóstico no invasivo de enfermedades oncológicas

• Agustina Corti,[1,2] Miguel A. Pasquale,[1,2] Fernando S. García Einschlag[1,2]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata*
[2] *Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas, CONICET y Universidad Nacional de La Plata*

Dado que a las patologías oncológicas se les atribuye la segunda causa de muerte en el mundo, la medicina ha desarrollado muchos modos de tratar el cáncer. Sin embargo, la clave para lograr un tratamiento eficaz sigue siendo su detección temprana. Es importante destacar que la principal dificultad para su detección radica en que el cáncer no posee síntomas por sí mismo, por lo que suele detectarse cuando avanzó lo suficiente para afectar el funcionamiento de algún órgano, estando ya en una etapa avanzada. Además, los signos y síntomas generales asociados con el cáncer no son específicos de esta enfermedad y varían según la parte del cuerpo afectada. En la actualidad existe una amplia variedad de métodos de diagnóstico para detectar la presencia de cáncer. Aunque en mayor o menor medida todos son efectivos, en general presentan ciertas desventajas a los fines de ser usados como método de screening (como por ejemplo ser específicos de determinados órganos, invasivos, extremadamente caros por requerir una instrumentación compleja, entre otras). Se evidencia entonces la necesidad de desarrollar un método simple, relativamente económico y no invasivo para evaluar la presencia de procesos oncológicos en las personas, independientemente de la ubicación del cáncer o del órgano afectado. La orina es un fluido corporal que se utiliza en métodos semi-cuantitativos de análisis habituales para el diagnóstico de algunas enfermedades. Entre la gran variedad de productos químicos orgánicos e inorgánicos disueltos en agua que constituyen la orina, se encuentran presentes ciertos fluoróforos endógenos. Debido a estos últimos, la orina posee una fuerte autofluorescencia al ser iluminada con luz de la longitud de onda apropiada. Según estudios científicos, los pacientes con cáncer, en cualquier etapa de su enfermedad, presentan variaciones en la concentración de algunas de estas sustancias respecto de las personas sanas que pueden reflejarse en los espectros de fluorescencia de sus orinas. Si bien la concentración de los múltiples componentes presentes en la orina puede variar fisiológicamente debido a efectos tales como la edad del paciente, el ritmo circadiano, el estado nutricional, el grado de hidratación y la actividad física, en general la orina presenta entre 3 y 5 máximos de fluorescencia. Los máximos observados no resultan de un único metabolito fluorescente sino más bien son el resultado de varias especies que poseen rasgos espectroscópicos similares, que en muchos casos son consecuencia directa de similitudes estructurales. Sin embargo, a pesar de la complejidad composicional de la orina es posible, a partir de un análisis exhaustivo de la información espectroscópica, detectar cambios en la fluorescencia y relacionarlos con ciertas enfermedades. En base a todos estos antecedentes, el propósito del trabajo que se presenta es determinar si las características espectrales de emisión de fluorescencia endógena de la orina proporcionan diferencias estadísticamente significativas entre los pacientes con algún tipo de cáncer y los sujetos sin esa patología. En este contexto se emplearon diferentes metodologías, basadas en el álgebra matricial y frecuentemente empleadas para el análisis de datos espectroscópicos, para la construcción de modelos blandos que faciliten la interpretación de datos multivariados y permitan el desarrollo de herramientas para el diagnóstico de situaciones patológicas. En resumen, en el presente trabajo se evalúa el potencial de diferentes técnicas de análisis multivariado y de métodos estadísticos que, a partir de la información proporcionada por espectros de absorción y de fluorescencia de orinas, faciliten el desarrollo de test capaces de diagnosticar patologías oncológicas.

Micro-tomografía de rayos X para caracterizar volumen del canal radicular extraído en instrumentación endodóntica

• Rocio Gilli,[1,2] Facundo Mattea,[1,3,4] Gabriela Martín,[5,6,7] Mauro Valente[1,8,9]

[1] *Laboratorio de Investigación e Instrumentación en Física Aplicada a la Medicina e Imágenes de Rayos X, FAMAF, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina.*
[2] *Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación, Universidad Nacional de Córdoba*
[3] *Departamento de Química Orgánica - FCQ - UNC, CONICET*
[4] *Instituto de Investigación y Desarrollo de Ingeniería de Procesos y Química Aplicada de Córdoba, Argentina*
[5] *Cátedra de Endodoncia, Facultad de Odontología, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina*
[6] *Carrera de Especialización de Endodoncia, Facultad de Odontología, Universidad Nacional del Nordeste, Argentina*
[7] *Carrera de Especialización de Endodoncia, Facultad de Ciencias de la Salud, Universidad Católica de Córdoba, Argentina*
[8] *Centro de excelencia en Física e Ingeniería en Salud (CFIS) - Universidad de La Frontera, Temuco; Chile*
[9] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*

Durante las últimas décadas, las técnicas analíticas de contraste por absorción por medio de imágenes por rayos X han cobrado sistemáticamente mayor protagonismo en diferentes ámbitos de investigación y aplicaciones clínicas, por su capacidad de explorar de manera no destructiva y no invasiva el interior de una muestra. En particular, la significativa mejora en resolución espacial que ofrece la micro-tomografía por rayos X en comparación con la tomografía computada convencional, ha promovido la inserción de esta técnica analítica en diversos campos biomédicos. Entre ellos, se destaca la odontología como una de las áreas de mayor impulso en su incorporación para diferentes aspectos desde caracterización anatómica de piezas dentales, pasando por determinación de propiedades morfológicas de accesorios como implantes, hasta procesos de control de calidad en procedimientos instrumentales como los tratamientos de conducto dentro del área de la endodoncia, donde la calidad del tratamiento es esencial para prevenir y controlar cualquier potencial infección del conducto radicular.
El presente trabajo reporta resultados sobre la metodología integral y original desarrollada e implementada para realizar la reconstrucción tomográfica de molares y premolares, y caracterizar el volumen extraído del canal radicular durante la instrumentación endodóntica. Para ello, se determinó una configuración apropiada del equipamiento para realizar el ensayo de micro-tomografía de rayos X a muestras dentales [1], se adaptó e implementó un algoritmo de reconstrucción tomográfica [2], que permitió obtener una representación tridimensional de la muestra, y se desarrolló y aplicó un procedimiento automático de identificación de cavidades dentro del conducto radicular, cuantificando el volumen por medio de un modelo de segmentación automático basado en contornos por gradientes e histogramas de la señal en la región de interés. La metodología propuesta fue satisfactoriamente comprobada en condiciones controladas y su implementación permitió caracterizar muestras odontológicas, obteniendo estimaciones del volumen instrumentado así como su visualización tridimensional de manera automática.

Referencias:

[1] Valente, M., Mattea, F., Martín, G., Moyano, T., and Pérez, P. *Adaptation of a microCT facility for automatic recognition of bioceramic-based sealers in molar root canals aimed at endodontic treatment quality control. X-ray Spectrom*, (2021).
[2] Alison. P., Fernández Bodereau, E., Moyano, T., Arguelles, S., Solla, C., Mattea, F., Valente, M., and Martín, G. *Obturación endodóntica de las raíces mesiales de molares inferiores con sellador Bio-C Sealer y AHPlus. Endodontic obturation of mesial roots of mandibular molars with Bio-C Sealer and AHPlus*, Methodo- UCC **5**, 129 (2020).

Estimación de dosis en fetos utilizando Monte Carlo

• Iván Exequiel Belloto,[1] Sebastián Triviño[1,2]

[1] *Centro de Medicina Nuclear y Radioterapia de la Patagonia Austral*
[2] *Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Santa Cruz*

A pesar de que el rango de dosis utilizado en las prácticas diagnósticas de medicina nuclear está por debajo del umbral de efectos determinísticos, es importante conocer la dosis recibida por el feto debido a posibles efectos estocásticos que podrían ocurrir luego de una administración de material radiactivo en la madre por prescripción médica o por error.
En este trabajo se realizó una primera estimación de la dosis recibida por el feto a partir de la dosis recibida por el útero en un estudio PET con 18F-FDG. Para ello se utilizó el software Monte Carlo PHITS 3.2.2 y los fantomas tetraédricos pertenecientes al software PARaDIM, considerando los valores de actividad acumulada presentados en distintas publicaciones. Los resultados obtenidos fueron comparados con datos de bibliografía.

Selección de filtro de reconstrucción para armonización de equipo PET-CT en el Centro de Medicina Nuclear y Radioterapia de la Patagonia Austral (CEMNPA)

• Malena Taube,[1,2,3] Iván Exequiel Belloto,[4] Maria Agustina Corti[2,3,5]

[1] *Centro de Investigaciones y Tranferencia de Santa Cruz*
[2] *Facultad de Ciencias Exactas - Universidad Nacional de La Plata*
[3] *Sociedad Argentina de Física médica*
[4] *Centro de Medicina Nuclear y Radioterapia de la Patagonia Austral*
[5] *Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas, CONICET y Universidad Nacional de La Plata*

La capacidad de detección que poseen los equipos PET hace posible una de las aspiraciones más sustanciales de la medicina nuclear: la cuantificación. La importancia cuantitativa e imagenológica del PET-CT es realmente fundamental debido a su utilización en el seguimiento de la respuesta a un tratamiento o control tumoral. Lo más frecuente en la práctica cotidiana es la utilización de parámetros semicuantitativos como el valor de captación estándar del radiofármaco (SUV). Esta herramienta es utilizada para ayudar al diagnóstico médico, comparando los valores medidos con valores de referencia para los distintos órganos. Sin embargo, el principal problema es su reproducibilidad ya que depende de factores técnicos como la calibración del PET, factores físicos como el tiempo de captación y/o factores biológicos como la biodistribución del radiofármaco en el paciente y/o los movimientos del mismo. Lo crucial de la armonización de un PET-CT se basa en poder realizar comparaciones de estudios multicéntricos. Realizar comparaciones de imágenes con equipos no armonizados puede resultar en discrepancias cuantitativas del valor SUV y en el diagnóstico del paciente, ya que cada centro cuenta con sus propios protocolos de adquisición, reconstrucción y procesado de imágenes a la hora de realizar los estudios PET-CT. Esto es especialmente importante para objetos que son pequeños respecto a la resolución espacial del equipo, lo cual tiene gran impacto en la cuantificación de los estudios PET. La armonización del equipo PET-CT requiere de materiales específicos como lo es el fantoma de esferas NEMA, así como también métodos y procedimientos definidos por la Asociación Europea de Medicina Nuclear (EANM). Para el análisis y evaluación de las imágenes de reconstrucción, la EANM establece valores límites en la cuantificación del coeficiente de recuperación de contraste (CRC), tanto máximo como promedio. Además, también fija el valor del ruido de fondo inferior al 15% para la adquisición con el mínimo tiempo de camilla. Debido a que la armonización requiere de la evaluación de múltiples imágenes, a las cuales se les deben ir variando el tipo de filtrado, frecuencia de corte, tipo de reconstrucción, entre otros, se utilizó el software PET HARMONIZATION TOOLBOX [1] para orientar la búsqueda a los parámetros de reconstrucción armonizados, y así reducir la cantidad de imágenes a analizar. Este software simula el fantoma de esferas NEMA a partir de un fantoma cilíndrico. De esta manera, se pudo obtener el estimativo del filtro óptimo del equipo en un tiempo razonable para luego poder determinar cuál es la reconstrucción que más se ajusta a los parámetros de la EANM para el equipo PET-CT de la institución, evaluandolos a partir del fantoma NEMA. En este trabajo se evaluaron 75 reconstrucciones de imágenes PET empleando diferentes subconjuntos, iteraciones, tipos de filtros y frecuencias de corte. Una vez evaluadas cada una de las curvas de los CRC máximo y promedio para los distintos tamaños de las esferas del fantoma NEMA en todas las reconstrucciones, se seleccionó la que mejor se adapta a los límites propuestos por la EANM. Los resultados permiten concluir que la imagen reconstruida mediante la técnica OSEM (Subconjunto Ordenado - Máxima Expectativa) empleando 2 iteraciones, 32 subconjuntos y un filtro de 8 mm PESADO SHARP es la indicada para la armonización del equipo PET-CT Discovery 610 del CEMNPA. El mínimo tiempo de camilla que logra tener un ruido en la imagen inferior al 15% para esta reconstrucción se consigue empleando 36 segundos. Mediante este trabajo se consiguió armonizar el equipo PET/CT más austral del país, al encontrar una reconstrucción de imagen PET que cumple con las especificaciones establecidas por la EAMN, lo cual permite intercomparar estudios con otros centros de medicina nuclear que cumplan con esta característica. Además, con esta reconstrucción se obtuvo una mejora significativa en la resolución y nitidez de las imágenes respecto de otros filtros estudiados,

permitiendo así mejorar la calidad diagnóstica de los estudios.

Referencias:

[1] M. Namías *et. al.*, *A novel approach for quantitative harmonization in PET*, Phys. Med. Biol. **63**, 095019 (2018).

Estimación de dosis a la médula ósea producida por [^{18}F]fluorotimidina en un estudio preclínico PET-CT en primate no humano

• Alejandro Valda,[1] María Bastianello,[2] Guillermo Casale,[3] Hugo Corradini,[2] Brenda Konowalik,[2] Carlos Nagle,[4] Teresita Manzur,[4] Dardo Riveros,[5] Guillermo Gette[4]

[1] *Centro Universitario de Imágenes Médicas, Escuela de Ciencia y Tecnología, UNSAM*
[2] *Sección de Imágenes Moleculares y Terapia Metabólica, Hospital Universitario CEMIC*
[3] *Laboratorios Bacon SAIC*
[4] *Centro de Investigación de Reproducción Humana y Experimental, Hospital Universitario CEMIC*
[5] *Sección de Hematología, Hospital Universitario CEMIC*

El compuesto fluoro-L-timidina marcado con ^{18}F ([^{18}F]FLT) es un radiofármaco que permite realizar, mediante el empleo de la tomografía por emisión de positrones (PET), una imagen molecular de la fase S del ciclo celular resultando, por lo tanto, un indicador de proliferación celular. Su uso es particularmente prometedor en el contexto del diagnóstico y de la valoración de la respuesta al tratamiento del linfoma difuso a células grandes B (LDCGB). La utilización de [^{18}F]FLT en aplicaciones clínicas y preclínicas en nuestro país y en la región data de hace pocos años. Por este motivo, y dadas las características de su biodistribución, se encaró un estudio dosimétrico preclínico cuyo objetivo fue evaluar la mielotoxicidad del radiofármaco en aplicaciones diagnósticas. El estudio se realizó utilizando un modelo animal en primate no humano Sapajus cay. Se estimó la dosis media absorbida en la médula ósea del animal y, a partir de de ésta, su extrapolación a humanos. El estudio contó con aprobaciones del Comité de Ética del Centro de Educación Médica e Investigaciones Clínicas (CEMIC) y del Comité Institucional de Cuidado y Uso de Animales de Laboratorio (CICUAL) de CEMIC; con notificación a la Administración Nacional de Medicamentos, Alimentos y Tecnología Médica (ANMAT) y aceptación del uso de radioisótopos en animales por parte de la Autoridad Regulatoria Nuclear (ARN). La conservación y trato de los animales se ajustó a normas y procedimientos internacionalmente aceptados (National Research Council-Institute for Laboratory Animal Research; Consejo de Organizaciones Internacionales de las Ciencias Médicas de la Organización Mundial de la Salud de 1985; y Declaración de Basilea de 2010). Todo el estudio PET-CT se realizó bajo anestesia y tuvo una duración aproximada de 70 minutos. Luego de finalizar la adquisición CT (tomografía de rayos X), se realizó la administración del radiofármaco por vía femoral y se dio inmediatamente inicio a la adquisición PET. La actividad inyectada fue de 15,4 MBq en un volumen de 1 ml. El estudio PET consistió en una secuencia de 99 adquisiciones temporalmente contiguas cuya duración varió entre 3 segundos, para los primeros dos minutos, y 5 minutos para las últimas adquisiciones, cubriendo un lapso total de 45 minutos. A continuación se realizó una adquisición estática de cuerpo entero. Para los órganos de interés —riñones, pulmones, hígado, corazón y médula ósea dentro de una región vertebral— se trazaron curvas de actividad en función del tiempo y se calculó la actividad acumulada normalizada. La dosis media absorbida en la médula ósea se determinó aplicando el esquema MIRD (por *Medical Internal Radiation Dosimetry*) al modelo de niño recién nacido según la publicación ICRP 89 [1]. En esta determinación se consideró un decaimiento físico de la actividad a partir del último instante de adquisición y se asignó el contenido de la vejiga urinaria al compartimiento denominado 'resto del cuerpo'. Finalmente se realizó la estimación de la dosis media que recibiría la médula ósea de un adulto humano extrapolando el resultado obtenido en el animal según la metodología descripta por Stabin [2] y los datos de masas del modelo ICRP de hombre adulto [1]. La dosis media obtenida en el modelo animal, por unidad de actividad administrada, fue de 8,7 μGy/MBq y su extrapolación al modelo humano adulto resultó en 32 μGy/MBq. Este resultado conduce a una estimación de dosis en la médula ósea de 12 mGy cuando se administra al paciente una actividad diagnóstica típica de 370 MBq (10 mCi). Siendo esta dosis muy inferior al umbral de mielotoxicidad de 2 Gy, se desprende que PET-CT con [^{18}F]FLT es una modalidad segura para el diagnóstico y seguimiento de pacientes con patología oncológica linfoproliferativa u otros tumores sólidos.

Referencias:

[1] J.Valentin, *Basic anatomical and physiological data for use in radiological protection reference values*, ICRP Publication 89. Sweden. Ann. ICRP **32** (2002).
[2] Stabin MG. *Fundamentals of nuclear medicine dosimetry*, Springer, New York, (2008).

Evaluación del Desempeño del Haz B3 del reactor RA-6 para el tratamiento del Melanoma Cutáneo utilizando Terapia por Captura Neutrónica en Boro

• Jessica Sofía Riback,[1] Lucas Provenzano,[2] Sara González[1]

[1] *Grupo de Dosimetría Computacional y Planificación de Tratamientos, CNEA- CONICET*
[2] *Grupo de Dosimetría Computacional y Planificación de Tratamientos del proyecto BNCT, Centro Atómico Constituyentes, Comisión Nacional de Energía Atómica*

La Terapia por Captura Neutrónica en Boro o BNCT es una terapia oncológica radiante que se utiliza para tratar tumores malignos de forma localizada. Consiste en la administración selectiva de un compuesto portador del isotopo estable, no radiactivo, de boro 10 en el tejido tumoral y la posterior irradiación con un haz externo de neutrones. Como resultado de esta acción combinada se generan partículas de alto LET. Estas partículas transfieren una gran cantidad de energía a lo largo de su corta trayectoria, produciendo un daño letal en la célula donde se originan o su entorno inmediato. Así, el efecto queda confinado a las células alcanzadas por el compuesto borado, minimizando el daño a los tejidos sanos circundantes.

En Argentina, este proyecto de investigación básica y clínica es desarrollado por CNEA en colaboración con instituciones médicas. El ensayo clínico en curso en el país para el tratamiento del melanoma cutáneo se encuentra en la fase II de investigación, y es llevado a cabo en colaboración con grupos médicos del hospital de oncología "Ángel Roffo" de la Universidad de Buenos Aires [1].
Los tratamientos realizados hasta la fecha se llevaron a cabo en el reactor nuclear RA-6 del Centro Atómico Bariloche, y los haces de neutrones empleados para tal fin se denominaron Haz B1 y Haz B2, este último operativo en la actualidad.
En consonancia con la ampliación de las capacidades de tratamientos en el reactor RA-6, un grupo del Departamento Física de Reactores y Radiaciones (CAB-CNEA) diseñó un nuevo dispositivo de filtrado y termalización para la sintonización del espectro de neutrones del haz terapéutico de BNCT del RA-6. A partir del llenado y vaciado de un filtro líquido, el diseño propuesto permitiría sintonizar dos espectros de neutrones diferentes: un espectro mixto térmico-epitérmico comparable al del haz B2 actual (haz B3, modo mixto), y un espectro de neutrones epitérmicos más penetrante en tejido para el tratamiento de lesiones profundas (haz B3, modo epitérmico) [2]
El objetivo del presente trabajo es evaluar el desempeño terapéutico del haz de BNCT recientemente diseñado B3 en modo mixto mediante el estudio y análisis de figuras de mérito físicas y radio-biológicas, aportando así al desarrollo del proyecto BNCT Argentina.
Para ello, se analizaron las características físicas primarias del nuevo diseño tanto en aire como en fantoma de referencia. También se evaluaron de forma retrospectiva casos clínicos tratados originalmente con el haz B1, a partir de nuevas simulaciones de tratamiento con el haz actual B2 y el nuevo diseño B3. Para realizar estas simulaciones fue necesario reconstruir la geometría de la anatomía tratada en un lenguaje que pueda ser leído e interpretado por el código de transporte de partículas empleado para simular la irradiación , MCNP. Esta reconstrucción, y la posterior determinación de la dosimetría obtenida con cada tratamiento se desarrolló con herramientas desarrolladas en CNEA, BNCT-Ar Dosimetry Tool y el código MultiCell.
Considerando que los resultados de todos los análisis realizados sustentan que el nuevo diseño propuesto posee un desempeño muy similar al del haz de tratamiento B2, e incluso potencialmente superior, se considera justificada la modificación de la facilidad actual para ampliar el espectro de aplicaciones clínicas con BNCT en el RA-6.

Referencias:

[1] Menéndez PR, Roth BMC, Pereira MD, Casal MR, González SJ, Feld DB, *et al.*, *BNCT for skin*

melanoma in extremities: Updated Argentine clinical results. Appl. Radiat. Isot. **67**, (Suplementos 7-8) S50 (2009).
[2] Longhino Juan Manuel, Santa Cruz Gustavo, Acuña Gregorio, and Lopasso Edmundo, *Informe Técnico: Evaluación computacional del desempeño de un filtro sintonizador de espectro neutrónico para la facilidad de BNCT del RA6*, Gerencia de Área Energía Nuclear, Unidad de Actividad de Energía Nuclear, CNEA, San Carlos de Bariloche (2017).

Impacto dosimétrico del ancho de la hoja del colimador multiláminas para tratamientos de radiocirugía de metástasis múltiples con isocentro único y el efecto de rotación por algoritmo genético usando Brainlab Elements

• José Alejandro Rojas-López,[1] Daniel Venencia,[2] Rogelio Manuel Díaz Moreno,[2] Silvia Zunino[2]

[1] *American British Cowdray Medical Center*
[2] *Instituto Zunino – Fundación Marie Curie – Córdoba, Argentina.*

Propósito: Analizar el impacto del ancho de la hoja del colimador de hojas múltiples (MLC) en la radiocirugía de metástasis múltiples (SRS) considerando la distancia objetivo al isocentro y los desplazamientos rotacionales. Método: Se optimizaron 10 planes. Los planos se crearon con Elements Multiple Mets SRS v2.0 (Brainlab AG, Munchen, Alemania). El número promedio de metástasis por plan fue de 5 $\pm$ 2 y el volumen promedio de GTV fue de 1.1 $\pm$ 1.3 cc. El criterio de margen de PTV se basó en la distancia del isocentro al GTV y las dimensiones del objetivo. Los planes se realizaron utilizando 6 MV con MLC de alta definición (HDMLC) y se volvieron a calcular utilizando MLC de 5 mm (SMLC). Los planes se compararon utilizando el índice de conformidad de Paddick (PCI), el índice de gradiente (GI), las unidades monitor (MU), el volumen que recibe la mitad de la isodosis recetada (PIVhalf), la dosis máxima al tronco encefálico, el quiasma óptico y los nervios ópticos y V12Gy, V10Gy y V5Gy para cerebro sano. El desplazamiento máximo debido a combinaciones rotacionales se optimizó mediante un algoritmo genético para ambos planes. Los planes se recalcularon y compararon utilizando un margen optimizado.
Resultados: los planes de HDMLC tuvieron una mejor conformidad y una caída de dosis más alta que los planes de SMLC. Las diferencias dosimétricas fueron estadísticamente significativas ($p \leq 0{,}05$). Cuanto menor sea el volumen de la lesión, mayores serán las diferencias dosimétricas entre ambos planes. El efecto de los desplazamientos de rotación producidos para cada objetivo en SRS no dependió del ancho de la hoja de MLC ($p \geq 0.05$). Conclusión: El HDMLC más fino ofrece ventajas dosimétricas en comparación con el SMLC en términos de conformidad del objetivo y dosis para los órganos circundantes en riesgo. Sin embargo, las diferencias dosimétricas debidas a las rotaciones no dependieron del ancho de la hoja de MLC.

Influencia de las heterogeneidades en el cálculo dosimétrico de braquiterapia ginecológica HDR: Un estudio por simulación Monte Carlo

• Marianela Hervias,[1,2] Mauricio Santibáñez,[2] Francisco Malano,[2,3] Camilo De la Barra,[2] Mauro Valente[2,3,4]

[1] *Universidad de Chile*
[2] *Universidad de La Frontera, Temuco, Chile*
[3] *Centro de excelencia en Física e Ingeniería en Salud (CFIS) - Universidad de La Frontera, Temuco; Chile*
[4] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*

El cáncer cérvico uterino es la quinta neoplasia maligna con mayor incidencia a nivel mundial y representa un problema de salud pública importante a nivel global [1-2]. Si bien en las últimas décadas se han introducido nuevas técnicas de tratamiento, la braquiterapia ginecológica continúa siendo una modalidad de tratamiento importante [3-4]. Tradicionalmente el cálculo de dosis en el ámbito clínico en braquiterapia se realiza utilizando el formalismo TG-43 [5], que describe el depósito de dosis producido por una fuente de radiación rodeada de agua, por lo que la mayoría de los sistemas computacionales de cálculo de dosis (denominados Treatment Planning System o TPS) modelan al paciente subdividiéndolo en pequeños volúmenes denominados vóxeles constituidos de agua, sin considerar heterogeneidades. Por otro lado, durante la última década se han introducido varios algoritmos de cálculo basados en modelos para braquiterapia (Model Based Calculation Algorithm, MBCDA's) que consideran la influencia de heterogeneidades, la composición de aplicadores y la anatomía del paciente [6]. Para el caso de braquiterapia ginecológica HDR, se ha encontrado que el uso de MBDCA's produce diferencias promedio menores al 5 % con respecto al formalismo del TG-43 empleado en los TPS [7]. Sin embargo, se ha reportado que pueden existir incertidumbres importantes al no considerar con precisión la composición atómica del tejido y del aplicador [8] y debido a la distribución de dosis por el movimiento en pasos discretos de la fuente [9].

En este trabajo se estudió el impacto que producen las heteroneidades propias de la anatomía de la pelvis sobre la dosimetría en el útero y en los órganos de riesgo más relevantes mediante simulaciones Monte Carlo realizadas con el código PENELOPE 2014 [10-11]. Se simuló la irradiación producida por una fuente de braquiterapia HDR de ^{192}Ir sobre un fantoma antropomórfico de pelvis especialmente diseñado para este estudio. La fuente de ^{192}Ir se simuló según el modelo GAMMAMED PLUS (Varian Medical Systems, Palo Alto, CA.). Se simularon independientemente ocho posiciones de la fuente en el tandem central separadas por 1 cm y dos posiciones en los ovoides con la misma separación. Los resultados de dosis de los órganos se contrastaron con simulaciones realizadas en un fantoma homogéneo de agua y Las distribuciones de dosis en ambos casos fueron comparadas utilizando un test de índice gamma.
Se encontró que el cálculo de dosis en agua sobrestima la dosis en el recto 1.47 ± 0.01 veces en comparación con el fantoma antropomórfico y que la dosis en las cabezas femorales fue 0.56 ± 0.02 veces menor con respecto al fantoma antropomórfico. Por otro lado, se encontró que las diferencias para el útero y vejiga están dentro del 5% en ambos casos. Los resultados de este trabajo concuerdan con los encontrados en la literatura y se concluye que, si bien el cálculo en agua produce resultados similares a los obtenidos en un fantoma antropomórfico, se debe prestar atención a las heterogeneidades propias presentes en la anatomía.

Referencias:

[1] J. Ferlay *et al.*, Int. J. of Cancer, **144**, no. 8 (2019).
[2] W. Small *et al.*, Cancer, **123**, no. 13 (2017).
[3] C. H. Holschneider *et al.*, Brachytherapy, **18**, no. 2 (2019).
[4] K. Tanderup, P. J. Eifel, C. M. Yashar, R. Pötter, and P. W. Grigsby, Int. J. Radiat. Oncol., **88**, no. 3 (2014).

[5] M. J. Rivard *et al.*, Med. Phys., **31**, no. 3 (2004).
[6] L. Beaulieu *et al.*, Med. Phys., **39**, no. 10 (2012).
[7] D. Jacob, M. Lamberto, L. DeSouza Lawrence, and F. Mourtada, Brachytherapy, **16**, no. 3 (2017).
[8] S. A. Enger, J. Vijande, and M. J. Rivard, Semin. Radiat. Oncol., **30**, no. 1 (2020).
[9] B. Farhood and M. Ghorbani, Radiol. Phys. Technol., **10**, no. 4 (2017).
[10] J. Baró, J. Sempau, J. M. Fernández-Varea, and F. Salvat, Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms, **100**, no. 1 (1995).
[11] F. Salvat, Ann. Nucl. Energy, **82**, (2015).

Modelo computacional y verificación experimental de rendimiento en profundidad en protonterapia para generación de Spread Out Bragg Peak (SOBP) en irradiaciones intracraneales

• Carolina Salinas Domján,[1,2] Diego Franco,[3] Mauro Valente[1,4,5,6]

[1] *Laboratorio de Investigación e Instrumentación en Física Aplicada a la Medicina e Imágenes de Rayos X, FAMAF, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina.*
[2] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*
[3] *Instituto Médico Deán Funes, Córdoba; Argentina*
[4] *Departamento de Ciencias Físicas - Universidad de La Frontera, Temuco, Chile*
[5] *Centro de excelencia en Física e Ingeniería en Salud (CFIS) - Universidad de La Frontera, Temuco; Chile*
[6] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*

Diferentes patologías a nivel intracraneal, como cáncer cerebral, metástasis e inclusive malformaciones arteriovenosas, pueden ser tratadas eficientemente con radioterapia. Para ello, pueden emplearse diferentes técnicas, desde radiocirugía con aceleradores lineales o arreglos de fuentes radioactivas, hasta haces de iones como protones. La protonterapia consiste en el uso de haces de protones de alta energía (60-250 MeV) y se aplica, principalmente, para tratar patologías intracraneales aprovechando la capacidad balística de este tipo de radiación combinando haces de diferente energía para el recubrimiento del target por medio de la técnica denominada Spread Out Bragg Peak (SOBP).
El presente trabajo reporta sobre una metodología de modelado computacional por medio de simulaciones Monte Carlo con el código FLUKA para describir los procesos físicos en irradiaciones de protonterapia. Se muestra la validación de la metodología propuesta por medio de comparación con datos experimentales de rendimiento dosimétrico en profundidad y se describe el procedimiento de generación de SOBP para aplicaciones en irradiaciones intracraneales.
Los resultados obtenidos por simulación fueron comparados y validados con los datos experimentales logrando buen acuerdo, mientras que el procedimiento de generación de SOBP ha mostrado alta efectividad de control local y protección de zonas a riesgo para aplicaciones intracraneales. Los datos de simulación sobre el rendimiento dosimétrico en profundidad de la metodología aplicada representan información de alto valor clínico, especialmente en la planificación y aplicación de tratamientos de radioterapia.

Efecto de campos magnéticos intensos sobre la trayectoria de electrones propagándose en medios materiales de baja densidad de interés para radioterapia MRI-LINAC

• Amiel Rocio Gayol,[1,2] Mauro Valente[1,2,3]

[1] *Laboratorio de Investigación e Instrumentación en Física Aplicada a la Medicina e Imágenes de Rayos X, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina.*
[2] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*
[3] *Centro de excelencia en Física e Ingeniería en Salud (CFIS) - Universidad de La Frontera, Temuco; Chile*

Los dispositivos de MRI-LINAC, que incorporan sistemas de imágenes por resonancia a aceleradores lineales de uso clínico, permiten guiar los procedimientos radioterapeuticos mediante imágenes in situ del paciente, representando así un nuevo tipo de tecnología con grandes expectativas futuras para la radioterapia de alta precisión. Esta técnica está basada en el uso de intensos campos magnéticos, por lo tanto la fuerza de Lorentz altera las trayectorias de electrones secundarios, y de partículas cargadas en general, modificando el campo de radiación ionizante, y pudiendo causar en consecuencia variaciones locales en la dosis. La ecuación principal de Boltzmann puede ser reformulada en términos de integrales definidas para aplicarse al modelado del transporte de radiación, incluyendo la presencia de campos magnéticos. Sin embargo, cuando el haz de partículas se propaga en un medio material, el carácter estocástico de las interacciones de la radiación con el mismo, aumenta considerablemente la dificultad del cálculo analítico del proceso de transporte de la radiación ionizante. En este contexto, el presente trabajo propone y describe una metodología para caracterizar mediante técnicas numéricas, como la simulación Monte Carlo, el efecto de intensos campos magnéticos sobre la trayectoria de partículas cargadas, propagándose en un medio material típicamente presente en situaciones de radioterapia. A modo de ejemplo de aplicación, se aplica y se reporta resultados obtenidos para el aire como material representativo de baja densidad presente en anatomía y entorno durante los tratamientos de radioterapia. Se desarrollaron subrutinas basadas en el código PENELOPE para modelar haces de electrones propagándose en aire con energías de 0.5 MeV, 1 MeV y 6 MeV, inmerso en campos magnéticos constantes, de intensidades dentro del rango 0.25 T - 2 T, típicamente utilizadas en la técnica de MRI-LINAC. Se desarrolló una metodología para evaluar de manera automática la variación de los radios de curvatura en la trayectoria de electrones debido a las interacciones con el medio material de baja densidad. Los resultados obtenidos indican que la trayectoria de los electrones aumenta su curvatura y disminuye el desplazamiento en la dirección radial, a medida que la intensidad de campo aumenta.

Distribuciones de gradientes inducidos por susceptibilidad magnética en modelos de materia blanca

• Jesús E. Fajardo,[1,2] Gonzalo A. Álvarez[1,2,3]

[1] *Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (CNEA-CONICET)*
[2] *Departmento de Fisica Medica, Centro Atómico Bariloche, CNEA, CONICET*
[3] *Instituto Balseiro - Universidad Nacional de Cuyo - Comisión Nacional de Energía Atómica*

Las Imágenes por Resonancia Magnética Nuclear (MRI) constituyen una poderosa herramienta para el estudio y estadificación de patologías de forma no-invasiva. Estas se basan en la medición de la señal inducida en bobinas debido a la precesión de la magnetización originada por los espines nucleares de los tejidos alrededor de un campo magnético. Diversas interacciones a las que estos ensambles de espines están sujetos se manifiestan en la señal y pueden utilizarse para obtener información de las estructuras que estos exploran a nivel microscópico. Actualmente la resolución de las imágenes de MRI es del orden de 1 mm^3, por lo que la información en cada voxel es un promedio de diversas interacciones físicas que ocurren en el interior de la muestra. Existen diversas técnicas en desarrollo que son prometedoras para obtener información sub-voxel, que permiten caracterizar el tejido a nivel microestructural. Una de ellas está basada en explotar las inhomogeneidades de campo magnético inducidas por cambios en la susceptibilidad magnética a nivel microscópico. Cambios en las distribuciones de gradientes inducidas por estos efectos, se asocian a distintas patologías, como por ejemplo la desmielinización axonal como marcador de demencia, alzheimer y la enfermedad de Huntington[1,2]. En este trabajo evaluamos la detección de tensores que caracterizan éstas distribuciones de gradientes de campo magnético (IGDT)[3] que existen dentro de un dado vóxel. En particular modelamos numéricamente, in-sílico, los cambios de las distribuciones de gradientes magnéticos internos en función de distintos parámetros microestructurales de la materia blanca en cerebro[4]. Mostramos resultados prometedores donde pueden detectarse alteraciones en los diámetros de axones, en la densidad de axones y la desmielinización utilizando distribuciones de gradiente interno como herramienta histológica de diagnóstico.

Referencias:

[1] Bartzokis G, *et al.*, Alzheimers & dementia, **3**, 122 (2007).
[2] Bartzokis G, *et al.*, Neurochemical research, **32**, 1655 (2007).
[3] G.A. Álvarez, *et al.*, Sci. Rep. **7**, 3311 (2017).
[4] J.E. Fajardo, G.A. Álvarez, Proc. Intl. Soc. Mag. Reson. Med. **29**, 1716 (2021).

Optimización del proceso de cuantificación de trazas nucleares mediante la técnica de autorradiografía neutrónica, aplicada a la determinación de ^{10}B en matrices biológicas

• Julia Sabrina Viglietti,[1,2] Gisela Saint Martin,[2] Verónica Andrea Trivillin,[2,3] Emiliano Cesar Cayetano Pozzi,[2] Silvia Isabel Thorp,[2] Paula Curotto,[2] Agustina Mariana Portu[2,3]

[1] *Instituto Dan Beninson, UNSAM-CNEA*
[2] *Comisión Nacional de Energía Atómica*
[3] *Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas*

La autorradiografía neutrónica con detectores de trazas nucleares (NTDs) es una técnica de análisis que permite determinar la cantidad y distribución de sitios de emisión de partículas cargadas en una muestra. En nuestro laboratorio, la técnica ha sido ampliamente utilizada para su aplicación en el estudio de la terapia por captura neutrónica en boro (BNCT). El interés en conocer la distribución espacial del ^{10}B a nivel tisular y celular se debe a que el éxito de la terapia depende de la acumulación preferencial del isótopo en el tejido neoplásico.
Las muestras utilizadas para el análisis autorradiográfico pueden ser obtenidas a partir de biodistribuciones en modelos animales, donde se infunde una cierta cantidad de un compuesto borado y luego de extraen los tejidos de interés. Se generan cortes delgados de tejido que se colocan sobre NTDs. Los arreglos se irradian con neutrones térmicos y se procesan, a fin de adquirir imágenes producto de la interacción de la radiación ionizante (en este contexto, partículas α e iones de ^{7}Li, emitidas en direcciones opuestas con la reacción ^{10}B(n,α)^{7}Li) con el material detector. En estas imágenes se observan marcas correspondientes a los sitios de daño, que se van a relacionar con las posiciones de átomos de ^{10}B, núcleo blanco de la reacción que las produjo. Así, se obtiene información acerca de la concentración del isótopo de interés en diferentes estructuras tisulares, mediante la co-localización de las imágenes autorradiográficas con imágenes histológicas de la misma muestra.
La correcta cuantificación dependerá de factores como la utilización de una curva de calibración representativa de las muestras de estudio, y una delimitación adecuada de las regiones tisulares. Para contribuir a la automatización del proceso, e independencia del criterio humano, en este trabajo se generó una herramienta para registrar y visualizar la delimitación de zonas de interés en la muestra, y para corregir la alineación de las zonas entre las imágenes histológicas y autorradiográficas. Además, se desarrolló un algoritmo de clasificación de las imágenes, para asegurar que las condiciones de adquisición sean adecuadas, utilizando técnicas de aprendizaje supervisado. Estas condiciones se establecieron a partir de las distribuciones de características morfológicas y de intensidad de píxel de los eventos cuantificados en las autorradiografías, que permitieron a su vez realizar un análisis de los eventos típicos correspondientes a trazas nucleares, diferenciándolos de las irregularidades en las imágenes. Se caracterizaron las distribuciones de parámetros tales como área, diámetro, homogeneidad, relación de aspecto y circularidad para diferentes conjuntos de imágenes de interés. La precisión global alcanzada por el algoritmo de clasificación fue de un 93%.
A fin de probar la utilidad de la herramienta, se analizaron muestras de tumor rodeado de piel circundante, provenientes de un modelo en estudio de cáncer de colon en ratas BDIX, obtenidas 3 hs post administración de borofenilalanina (46.5 mg ^{10}B/kg). Se utilizaron láminas de policarbonato como NTD, y se irradió con una fluencia de neutrones térmicos de 10^{12}n/cm^2 en la Facilidad Central de Columna Térmica del RA-3 (Centro Atómico Ezeiza, CNEA). Los daños en el material fueron amplificados mediante un ataque químico con una solución PEW (30 g KOH, 90 g H_2O, 80 g alcohol absoluto) a 70C por 2 min, para observarlos por microscopía óptica y adquirir las imágenes. Los resultados preliminares mostraron una relación de concentración entre tumor y piel circundante (tejido normal) de T:N=2.3$\pm$0.6, consistente con resultados globales obtenidos con otras técnicas. La herramienta demostró ser de gran utilidad para completar la cuantificación de boro mediante la técnica autorradiográfica, optimizando tiempos de análisis. Parte del trabajo futuro consistirá en completar los

estudios de microdistribución de boro para el modelo animal mencionado.

Influencia del volumen activo de cámaras de ionización en la dosimetría de campos pequeños. Un estudio de Monte Carlo

• Camilo De la Barra,[1] Francisco Malano,[1,2] Mauricio Santibañez,[1] Marianela Hervias,[1,3] Mauro Valente[1,2,4]

[1] *Departamento de Ciencias Físicas - Universidad de La Frontera, Temuco, Chile*
[2] *Centro de excelencia en Física e Ingeniería en Salud (CFIS) - Universidad de La Frontera, Temuco; Chile*
[3] *Universidad de Chile*
[4] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*

La radioterapia es, junto con la cirugía y la quimioterapia, uno de los pilares fundamentales para el tratamiento de los tumores malignos. En la última década se ha visto un auge en el uso de técnicas de irradiación modernas que utilizan campos pequeños de radiación para producir una conformación de dosis más alta para los tumores [1]. Un campo de radiación se considera pequeño cuando hay una pérdida de equilibrio de partículas de carga lateral en el centro del haz, cuando hay colimación parcial de la fuente o cuando las dimensiones del detector son comparables al tamaño del campo. Estas características requieren consideraciones especiales para la realización de la dosimetría [2] y las investigaciones sobre este tema han culminado en el establecimiento del protocolo TRS-483 del Organismo Internacional de Energía Atómica [3].
En el presente trabajo se estudió el efecto en la medición de la dosis del volumen sensible de las cámaras de ionización en campos pequeños de radiación. Para ello, se realizaron simulaciones de Monte Carlo utilizando el código PENELOPE 2014 [4]. En las simulaciones se utilizó un diseño de geometría realista de la cámara semiflex PTW 31013 y la cámara de pinpoint PTW31023. Se simuló la geometría de un cabezal básico de un acelerador sin filtro aplanador con un blanco de tungsteno de 0,2 cm de espesor y dos pares de mandíbulas de tungsteno para producir campos cuadrados de 1, 2, 3, 5, 7.5 y 10 cm^2.
Se estudió la respuesta de las cámaras de ionización para estos campos de radiación y se investigó la influencia del espectro de energía absorbida en el volumen sensible, así como la fluencia de partículas de electrones y fotones por separado. Los resultados mostraron que la dosis absorbida en el volumen sensible depende efectivamente del tamaño del campo, obteniendo un factor de salida de 0.65 ± 0.04 y 0.69 ± 0.11 para el campo de radiación de 1 cm^2 para las cámaras semiflex y pinpoint, respectivamente. Se obtuvo que la cámara con mayor volumen sensible, tiene una mayor dependencia del tamaño del campo, y esto podría estar relacionado con el espectro de energía absorbida y la fluencia de partículas. Para reducir la incertidumbre se necesitarían espacios de fase con estadísticas más altas.

Referencias:
[1] Lam *et al.*, Radiation Physics and Chemistry. DOI(2021)
[2] Alfonso *et al.*, Medical Physics. DOI (2008).
[3] Andreo *et al.*, International Atomic Energy Agency (2017).
[4] Salvat *et al.*, Annals of Nuclear Energy. DOI (2015).

Caracterización del Detector XRC-100-CdTe mediante técnicas de simulación Monte Carlo basada en PENELOPE

• Nicolás Eugenio Martín,[1,2] Miguel Sofo Haro,[3] Mauro Valente[1,2,4]

[1] *Laboratorio de Investigación e Instrumentación en Física Aplicada a la Medicina e Imágenes por Rayos X (LIIFAMIRx), Universidad Nacional de Córdoba, M. Allende s/n, Córdoba, Argentina.*
[2] *Instituto de Fisica Enrique Gaviola*
[3] *Centro Atomico Bariloche - Comisión Nacional de Energía Atómica*
[4] *Centro de excelencia en Física e Ingeniería en Salud, CFIS amp; Departamento de Ciencias Físicas, Universidad de La Frontera, Temuco; Chile.*

Durante las últimas décadas, los detectores de radiación de semiconductores han logrado significativos avances que promovieron su uso para sustituir a los detectores de centelleo. Comparativamente, los semiconductores, como el teluro de cadmio (CdTe) han demostrado mayor capacidad y rendimiento en términos de sensibilidad, resolución energética y resolución espacial.
El propósito del presente trabajo es desarrollar e implementar un modelo basado en simulación Monte Carlo, para caracterizar la eficiencia intrínseca del volumen sensible del detector Amptek USA, modelo XR-100-CdTe. Se adaptó una subrutina de simulación Monte Carlo, basada en el código PENELOPE, para definir e incorporar las propiedades físicas y geométricas del volumen sensible del detector, cristal de CdTe, y estudiar la respuesta a la irradiación con diferentes haces tipo pencil beam mono-energéticos de rayos X. Se computaron 1E6 historias en cada caso, alcanzando incertezas estadísticas apropiadas, lo que permitió estimar la curva de eficiencia intrínseca en el rango [5, 1000] keV. Asimismo, se implementó un modelo teórico, basado en aproximación a primer orden de componente primaria, con el que se obtuvo una estimación analítica de la curva de eficiencia intrínseca para el cristal de CdTe. Los resultados obtenidos fueron comparados con información provista por el fabricante, obteniendo un promisorio acuerdo, con discrepancias que permanecen dentro del 3% en el amplio rango de energía estudiado.

Palabras clave: detectores de CdTe, eficiencia, espectrometría de rayos X, simulaciones de Monte Carlo.

Factibilidad del uso del compuesto MgO:Ce, Li en Dosimetría por Fibra óptica en Radioterapia

• Yohanna Fernández,[1,2] Víctor Orante Barrón,[3] Pablo Molina,[1,2] Julián Marcazzó[1,2]

[1] *Instituto de Física Arroyo Seco - Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires*
[2] *Centro de Investigaciones en Física e Ingeniería del Centro de la Pcia. de Buenos Aires (CIFICEN), UNCPBA - CONICET, Tandil, Argentina*
[3] *Departamento de Investigación en Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora, Hermosillo, Sonora, México*

La dosimetría in vivo es un método directo para medir la dosis entregada a pacientes con cáncer en un tratamiento de radioterapia. El objetivo es verificar que el tratamiento se lleve a cabo según lo prescrito. Es un método adecuado tanto para supervisar la entrega en el tratamiento como para detectar errores tempranos durante el mismo, como los que se pueden producir por errores en la calibración de la dosis, movimientos del paciente, etc. [1]. Para detectar de forma rápida estos errores es necesario que además el sistema dosimétrico sea en tiempo real. Una técnica que cumple con estas características es la Dosimetría por fibra óptica (DFO). Una práctica muy usual en dosimetría es la caracterización y el control del haz de radiación de un equipo, a través de distintos experimentos. Uno de ellos es el porcentaje de dosis en profundidad (PDD), el cual representa la variación de la dosis absorbida en un medio material con la distancia, a lo largo del eje del haz. Se expresa en porcentaje respecto del valor máximo. Esta función depende de la energía del haz, la distancia de la fuente a la superficie del medio, del tamaño de campo y de la profundidad en el medio. A partir del estudio preliminar de las propiedades radioluminiscentes (RL) del compuesto MgO doblemente dopado con Ce y Li, se procede a realizar las curvas de porcentaje de dosis en profundidad (PDD) para diferentes tamaños de campo (TC) mediante simulaciones MC, y así, evaluar la posible aplicación de este compuesto en facilidades de Radioterapia.

Referencias:

[1] *Development of Procedures for In Vivo Dosimetry in Radiotherapy*, Technical report, International Atomic Energy Agency. (2013).

Investigación básica y aplicada en el Acelerador TANDAR

• Andres Arazi,[1] Daniel Abriola,[1] Martín Alurralde,[1] Martín Aversa,[1] Ezequiel de Barbara,[1] Joaquín de Jesús,[1] Emmanuel de la Fourniere,[1] María Angélica Cardona,[1] Mario Debray,[1] Jorge Fernández Niello,[1] Tomás Giudice,[1] Fernando Gollan,[1] Daniel Hojman,[1] Guillermo V. Martí,[1] Alberto Pacheco,[1] Barbara Paes,[1] Darío Rodrigues,[1] Nicolás Samsolo,[1] David Schneider[1]

[1] *Tandar - Comisión Nacional de Energía Atómica*

El TANDAR (TANDem ARgentino) es un acelerador electrostático capaz de generar haces de iones pesados (de protones a uranio) con energías que superen la repulsión electrostática entre los núcleos atómicos. Así, pueden estudiarse los mecanismos de reacción que operan entre ellos (como fusión, quiebre o transferencia), emulando los procesos estelares, y estudiar así su estructura y sus mecanismos de reacción. Asimismo, hay una cantidad creciente de aplicaciones para este acelerador: análisis de muestras por rayos X inducidos por partículas (PIXE), detección de radiotrazadores por espectrometría de masas (AMS) o estudio del daño por radiación en circuitos electrónicos, en paneles solares o en células biológicas. En esta presentación explicaré el principio de funcionamiento de este acelerador y describiré sus principales líneas de investigación básicas y aplicadas.

Estudio de los múltiples canales de reacción del núcleo débilmente ligado 2H con blancos de 197Au

• Tomás Giudice,[1] Daniel Abriola,[1] Andrés Arazi,[1,2] Martín Aversa,[1] María A. Cardona,[1,2] Daniel Hojman,[1,2] Ezequiel de Barbará,[1] Rodolfo Id Betan,[3] Miguel S. Kohen,[1] Jesús Lubian,[4] Guillermo Martí,[1] Alberto Pacheco,[1,2] Barbara Paes,[1] David Schneider,[1] Hugo Soler[4]

[1] *Departamento de Física, Laboratorio Tandar, Comisión Nacional de Energía Atómica*
[2] *CONICET*
[3] *Instituto de Física de Rosario, CONICET-UNR*
[4] *Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense*

A pesar de su simplicidad, el deuterón (2H) presenta todos los mecanismos de interacción de los núcleos más pesados: puede dispersarse elástica o inelásticamente (Q = 0), transferir un neutrón al blanco de 197Au (Q=+4,29 MeV), formar un tritón al tomar un neutrón del 197Au (Q = -1,82), quebrarse en p + n (Q=-2,22 MeV) o fusionarse al blanco, formando 199Hg en estado excitado, desde el cual evapora dos neutrones. Por lo tanto, el estudio experimental del sistema 2H + 197Au permite poner a prueba los modelos que describen los variados mecanismos de reacciones nucleares.
En el Acelerador TANDAR se realizaron experimentos a energías entre 5 y 16 MeV. La dispersión de partículas fue observada con detectores "telescópicos" de silicio que permiten discriminar los productos de las reacciones (1H, 2H, 3H y 4He) e identificar los procesos mencionados, particularmente la dispersión elástica y los procesos de quiebre y transferencia. Luego de la irradiación, se detectaron los rayos gamma provenientes de los productos de fusión-evaporación y transferencia atrapados en el blanco (197Hg, 196Au y 198Au).
En esta oportunidad, además del análisis de dispersión elástica en el marco del modelo de potencial óptico, presentamos nuevos resultados del análisis de datos de los procesos de quiebre y transferencia. Se han comparado distribuciones angulares de procesos de quiebre con cálculos CDCC (Continuum Discretized Coupled Channels).

Cálculos de canales acoplados para proyectiles débilmente ligados en interacción con 197Au

• Barbara Paes,[1] Daniel Abriola,[1] Marcos A. Alvarez,[2] Andrés Arazi,[1] Maria A. Cardona,[1] Ezequiel de Barbará,[1] J. de Jesús,[1] Fernando Gollan,[1] Daniel Hojman,[1] Rodolfo M. Id Betan,[3] Jesús Lubián,[4] Alberto J. Pacheco,[1] David Schneider,[1] Hugo O. Soler[4]

[1] *Tandar - Comisión Nacional de Energía Atómica*
[2] *Departamento FAMN, Universidad de Sevilla, España*
[3] *Instituto de Física Rosario, Universidad Nacional de Rosario, Rosario, Argentina*
[4] *Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense*

En los últimos años ha tenido un gran impulso el estudio tanto experimental como teórico de los mecanismos de reacción que involucra núcleos débilmente ligados a energías cercanas a la barrera de Coulomb. Los cálculos teóricos incluyen el uso de potencial de interacción nuclear sin parámetros libres, como es el potencial de São Paulo (SPP) [1], el tratamiento consistente de los canales elástico, inelástico, transferencia, quiebra y fusión [2-4], junto con la dependencia energética del potencial óptico cerca de la barrera de Coulomb [5-8] y el efecto de los canales de quiebra sobre la fusión y otros canales de reacción [3,9-14]. En este trabajo, se presentarán los cálculos realizados para las secciones eficaces de transferencia de un neutrón, de fusión completa e incompleta para los proyectiles 9Be y los que están siendo realizados para 2H y 13C sobre blancos de 197Au. Estos cálculos serán cotejados con mediciones experimentales realizadas en el Laboratorio TANDAR. Para determinar las secciones eficaces de los canales elástico e inelástico se utilizaron cálculos de canales acoplados, para la sección eficaz de transferencia de un neutrón se aplicaron cálculos de canales de reacción acoplados y también cálculos de canales acoplados con discretización del continuo de tres cuerpos para determinar el efecto del canal de ruptura sobre los otros mecanismos de reacción.

Referencias:

[1] L.C. Chamon *et al.*, Phys. Rev. C **66**, 014610 (2002); Phys. Rev. Lett. **79**, 5218 (1997).
[2] A. E. Woodard *et al.*, Nucl. Phys. A **873**, 17 (2012).
[3] D. R. Otomar *et al.*, J. Phys. G **39**, 115103 (2012).
[4] D. Pereira *et al.*, Nucl. Phys. A **826**, 211 (2009).
[5] M. S. Hussein, P. R. S. Gomes, J. Lubian and L. C. Chamon, Phys. Rev.C **73**, 044610 (2006).
[6] A.M. M. Maciel *et al.*, Phys. Rev. C **59**, 2103 (1999).
[7] J.M. Figueira *et al.*, Phys. Rev. C **73**, 054603 (2007).
[8] P. R. S. Gomes *et al.*, Phys. Rev. C **70**, 054605 (2004).
[9] L.F. Canto *et al.*, Nucl. Phys. A **821**, 51 (2009); J. Phys. G **36**, 015109 (2009).
[10] J. Lubian *et al.*, Phys. Rev. C **64**, 027601 (2001).
[11] J. Lubian *et al.*, Phys. Rev. C **79**, 064615 (2008).
[12] C. H. Dasso and A. Vitturi, Phys. Rev. C **50**, 12 (1994).
[13] K. Hagino, A. Vitturi, S. M. Lenzi and C. H. Dasso, Phys. Rew. C **61**, 7602 (2000).
[14] J. A. Christley, C. H. Dasso, S. M. Lenzi, M. A. Nagarajan and A.Vitturi, Nucl. Phys. A **587**, 390 (1995).

Reacciones de transferencia en el sistema 6Li+89Y con energias cerca de la barrera coulombiana

• Hugo Soler,[1] Jesus Lubian Rios,[1] Barbara ESTHER DA FONSECA PAES RIBEIRO[2]

[1] *Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense*
[2] *Tandar - Comisión Nacional de Energía Atómica*

The objective of this work is to study of three possible transfer reactions that can occur in the system $^{6}Li + ^{89}Y$ at energies close to the Coulomb barrier. To analyse the relevance of the different transfer mechanisms, coupled reaction channels calculations (CRC) were performed, using the FRESCO code. The one-neutron transfer reaction was reanalyzed, taking into account the results of Zhang et all 2018. For the one-proton transfer reaction, calculations using spectroscopic amplitudes from extensive shell model calculaiotns and assuming value equal to 1.0 were performed, with the goal to identify the influence of increase theses amplitudes in the cross section. In the one-deuteron transfer reaction there were take into account two kind of mechanism: the direct transfer reaction and the sequential transfer reaction in which a proton is transferred firstly then a neutron or a neutron is transferred followed a proton. The São Paulo potential (SPP) was used for the imaginary and real parts of the optical potential and a Woods-Saxon potential generate the single-particle wave functions was employed. As a result for the one-neutron transfer for the $^{89}Y(^{6}Li,^{5}Li)^{90}Y$ reaction, we obtained a predominance of the transfer reaction. Otherwise, for the one-proton transfer $^{89}Y(^{6}Li,^{5}He)^{90}Zr$ and one-deuteron transfer $^{89}Y(^{6}Li,^{4}He)^{91}Zr$ reactions, the theoretical results indicated that other reactions, such as the breakup followed by incomplete fusion, might be more relevant reaction mechanisms than the transfer one. this fact allows us to believe that in order to obtain a good description of the experimental data, these other reactions mechanisms must be included in the coupling scheme.

Complete and incomplete fusion of 7Li projectiles on heavy targets

• Jesus Lubian Rios[1]

[1] *Debe ingresar al menos una filiación.*

We present a detailed discussion of a recently proposed method to evaluate complete and incomplete fusion cross sections for weakly bound systems. The method is applied to collisions of 7Li projectiles on different heavy targets, and the results are compared with the available data. The overall agreement between experiment and theory is fairly good.

Análisis microscópico de la clusterización Alfa en los núcleos ^{44}Ti y ^{212}Po

• Alan Cruz Dassie,[1,2,3] Rodolfo M. Id Betan[1,2,3]

[1] *Instituto de Física de Rosario, CONICET-UNR*
[2] *Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura - Universidad Nacional de Rosario*
[3] *Instituto de Estudios Nucleares y Radiaciones Ionizantes*

Aproximaciones teóricas al decaimiento alfa asumen la clusterización de cuatro nucleones desde un primer momento. Estos modelos, mediante parametrizaciones convenientes, permiten la obtención de la vida media del núcleo madre del decaimiento, y buscan acercarse a los valores experimentales más recientes. Para ello, es necesario describir correctamente la clusterización de los cuatro nucleones. El modelo utilizado permite establecer una base de cuatro partículas que defina correctamente el sistema bajo estudio, describiendo la clusterización en núcleos típicos.
En esta charla presentamos el estudio de la clusterización en los núcleos ^{44}Ti y ^{212}Po a partir de los grados de libertad de los nucleones. Para esto, se consideró la interacción espín-isoespín efectiva entre pares de nucleones, modelizada como una interacción Gaussiana.
Los núcleos ^{42}Ca y ^{42}Ti fueron diagonalizados en la base de Berggren de partícula simple para protones y neutrones, respectivamente. Esto permitió armar la base para calcular las energías y las funciones de onda del estado fundamental y los estados excitados 0^+ del núcleo ^{44}Ti. Lo mismo fue realizado sobre los núcleos ^{210}Pb y ^{210}Po, pero para caracterizar los estados del ^{212}Po.
Mediante esto, pudimos observar como el estado fundamental del núcleo ^{44}Ti es altamente colectivo, mientras que en contraposición, el estado fundamental del ^{212}Po no presenta caracteristicas colectivas en la distribución de sus amplitudes parciales. Si nos centramos en el primer estado excitado 0^+ del ^{212}Po, podemos apreciar que sus amplitudes presentan una colectividad similar a la observada en el estado fundamental del núcleo ^{44}Ti.

Métodos matriciales aplicados al cálculo de factores de corrección por efectos de coincidence summing en espectros gamma

• Enrique Ramón González[1]

[1] *Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación. Universidad Nacional de Córdoba*

Por "coincidence summing" se conoce en la literatura científica al fenómeno por el cual, dos o más fotones provenientes del decaimiento de un mismo núcleo radiactivo interactúan con el detector dentro de un tiempo muy corto de modo tal, que el mismo no los puede resolver separadamente. Los factores de corrección por "coincidence summing" corrigen la variación en el número de cuentas de los fotopicos en espectros gamma, debidos a este efecto. Cuando se plantea de forma manual las ecuaciones de conteo pueden cometerse errores u omisiones debido a la relativa complejidad de las mismas en algunos casos. Por el contrario, mediante el uso de recientes métodos matriciales las ecuaciones pueden ser obtenidas de una manera simple y eficiente. Este método, además es factible de ser automatizado lo cual agiliza el proceso. El cálculo experimental de los factores de corrección por efectos de coincidencia, requiere disponer de fuentes mono-energéticas calibradas que emitan fotones de las mismas energías que las fuentes que se desea medir. Además estas, deben tener la misma forma, tamaño y densidad. Esta condición, no es fácil de lograr dado que requiere el diseño de fuentes adaptables a cada caso particular debido a que los factores de corrección difieren para cada fuente. En este trabajo, se ha aplicado un método implementado en un trabajo anterior para obtener las ecuaciones de conteo y los factores de corrección por coincidence summming en función de parámetros conocidos y las eficiencias. Esto se hizo para dos geometrías distintas (puntual y volumétrica) y para algunos decaimientos de importancia en espectrometría gamma. Las eficiencias fueron obtenidas mediante simulación Monte Carlo.

Física Nuclear experimental en pandemia ¿Limitación u oportunidad?

• Miguel Angel Carrillo,[1] Benjamín Straube,[1] Emanuel Shai Comedi,[1] Rosa Micaela Serra[1]

[1] *Laboratorio de Transductores y Física Nuclear, Depto. de física, FACET - UNT*

Durante el primer cuatrimestre de 2020, a causa de la pandemia de COVID 19, se restringió el ingreso de docentes y estudiantes a los edificios universitarios en todo el territorio nacional. Ante esta situación, el Laboratorio de Transductores y Física nuclear (LTFN) de la Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología de la Universidad Nacional de Tucumán avanzó con la virtualización de los experiencias de laboratorio de su asignatura "Física Nuclear" con el objeto de que los estudiantes no perdiesen las vivencias propias de las experiencias reales. Esta situación se fue extendiendo en el tiempo y, lejos de representar una limitación para la enseñanza experimental de la asignatura, en poco tiempo, permitió lograr la eliminación de barreras temporo-espaciales para su abordaje. El dictado se fue dando en forma asincrónica, con lo que los estudiantes podían manejar sus tiempos con total libertad. La virtualización de experiencias de laboratorio, desarrollada mediante herramientas de fácil acceso, permitió mediciones y análisis de resultados desde cualquier punto del país y del exterior con un set experimental de costo cero para cada alumno. Herramientas tan populares como Microsoft Power Point y GeoGebra fueron utilizadas de manera novedosa para crear instrumentación virtual de medición. Se logró concretar el dictado de la asignatura sin sacrificar contenidos ni carga experimental a pesar de la situación particular que vive el mundo. Se facilitó su cursado desde lugares tan lejanos como Salta y Buenos Aires y se posibilitó la realización de mediciones Nucleares virtuales en un reconocido curso-taller de la Comisión Nacional de Energía Atómica (el Laboratorio Cero), tradicionalmente desarrollado de forma presencial en el Centro Atómico Constituyentes pero, esta vez, desde Tucumán y con la participación de alumnos de varias provincias argentinas y de otros países, como Paraguay, Perú y México. Este fue un largo sueño, ahora, hecho realidad. La extensión de esta oferta formativa más allá del aislamiento y de los límites provinciales y nacionales representó un gran avance para la asignatura Física Nuclear, como así también la posibilidad de su cursado desde cualquier lugar con una considerable carga experimental y riesgo radiológico nulo. En definitiva, esta terrible situación sanitaria global, está dejando, por una parte, muchísimo dolor pero, por otra, grandes oportunidades en el ámbito educativo y laboral si se las sabe aprovechar. Así como la propagación de la enfermedad se produjo en forma exponencial, la propagación de la virtualidad y de las capacidades docentes digitales, también.

Organización de patrones "Erizados" en la superficie de ondas estacionarias

• Pablo Gutierrez[1]

[1] *Instituto de Ciencias de la Ingeniería, Universidad de O'Higgins*

Estamos interesados en cómo pequeñas partículas se aglomeran en las interfaces de un líquido. Esto ocurre tanto a gran escala, por ejemplo con basura plástica flotando en el océano, como a pequeña, cuando partículas de té se reúnen al fondo de una taza, tras haber revuelto el contenido. En ambas situaciones, los flujos presentes en el líquido juegan un rol central.
Hemos abordado experimentalmente la aglomeración de partículas micrométricas debida a flujos, en el caso de un líquido sometido a ondas estacionarias. Mientras desarrollábamos estos experimentos, descubrimos un patrón sorprendente en la superficie: las partículas conforman un óvalo con "puntas" que emergen periódicamente, tomando una forma semejante a un erizo. Apoyados en experimentos complementarios y simulaciones numéricas, concluimos que estos patrones se deben a la conjunción de tres fuentes de flujo diferentes, lo cual discutiremos en esta charla.

Obs: Charla Invitada conjunta de las divisiones de **Materia Blanda** y **Fluidos y Plasma**.

Ondas de Alfvén en plasmas parcialmente ionizados

• Patricia Sallago[1]

[1] *Facultad de Ciencias Astronómicas y Geofísicas - Universidad Nacional de La Plata*

Se estudia el problema de la propagación de ondas de Alfvén en plasmas parcialmente ionizados (PIP) cuando los términos de gradiente de presión electrónica, Hall y ambipolar de la ley de Ohm se tienen en consideración. En lugar de linealizar el sistema de ecuaciones y desarrollar la perturbación en ondas planas se propone que ésta satisfaga las condiciones de onda de Alfvén. De tal modo se encuentra una solución que en el límite cuando el plasma está totalmente ionizado coincide con el resultado hallado en un trabajo anterior por Sallago y Platzeck (2004, doi:10.1029/2003JA009920) para las ondas de Alfvén en la magnetohidrodinámica con término de Hall. Si los términos de Hall y de gradiente de presión electrónica se anulan, la solución para plasmas PIP en el límite linealizado es similar a la hallada por De Pontieu, B. Martens, P. C. H. y Hudson, H. S. (2001, doi = 10.1086/322408).

Relaciones de dispersión linealizadas en hidrodinámica viscosa relativista

• Guillermo Perna,[1,2] Esteban Calzetta[1,2]

[1] *Instituto de Física de Buenos Aires, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales CONICET- Universidad de Buenos Aires*
[2] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*

Calculamos las relaciones de dispersión para los modos escalares, vectoriales y tensoriales de un fluido viscoso relativista, linealizando alrededor del equilibrio, para una teoría de tipo divergencia (que, en el límite lineal, contiene a las teorías de Israel-Stewart e Hidrodinámica Anisotrópica como casos particulares) y los comparamos con los correspondientes resultados derivados a partir de la teoría cinética bajo la aproximación de tiempo de relajación y teorías causales de primer orden. Llegamos a la conclusión de que todos estos enfoques acusan una dinámica similar para los modos escalares y vectoriales, mientras que la teoría de tipo divergencia particular presentada en este trabajo también contiene ondas tensoriales propagantes amortiguadas en concordancia con la teoría cinética. Los modos no hidrodinámicos son también una característica de los fluidos holográficos. Una descripción adecuada de estos modos es esencial en aplicaciones que involucran la interacción entre fluidos y ondas gravitacionales.

Estudio del flujo y la absorción durante el crecimiento de un hidrogel con soluto en su interior

• Sebastian Falcioni,[1] Yanina Lucrecia Roht,[1] Leonardo David Binda,[1] Germán Drazer,[2] Irene Paula Ippolito[1]

[1] *Grupo de Medios Porosos, Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires*
[2] *Mechanical amp; Aerospace Engineering Department, Rutgers University, EEUU.*

Los hidrogeles son estructuras poliméricas que al ponerse en contacto con agua poseen la propiedad de absorber una gran cantidad de ésta, hinchándose y aumentando considerablemente su tamaño. La adición de sales o disolventes orgánicos en solución pueden afectar la capacidad de absorción de estos materiales. El objetivo de este trabajo es estudiar cómo afecta al crecimiento de perlas de hidrogeles comerciales la presencia de diferentes proporciones de glicerina en solución acuosa. Para ello, se realizaron dos experiencias complementarias: medición del hinchado con una técnica gravimétrica y la visualización del tamaño del hidrogel dentro de una celda estanca. Para la primera de ellas, se sumergió una muestra de hidrogeles secos en diferentes soluciones acuosas de glicerina (0, 10, 20, 40, 50, 60 y 80 % w/w) durante un tiempo determinado. Luego, se los extrajo, escurrió y pesó para determinar la masa alcanzada a cada tiempo, con la cual posteriormente se cuantifica la absorción. En la segunda experiencia se diseñó un dispositivo experimental formado por una celda estanca de paredes transparentes que nos permite visualizar el crecimiento de un hidrogel sumergido en las diferentes mezclas de agua-glicerina en función del tiempo. Durante estas experiencias se adquirieron imágenes en intensidad de luz transmitida a través de la apertura de la celda con una cámara de vídeo de alta resolución (Coolsnap) a intervalos de tiempo constante. De esta forma, se obtuvo el diámetro externo del hidrogel en función del tiempo y, además, se caracterizó el decrecimiento de la zona seca del hidrogel a medida que este absorbe solución. Se encontró que, a medida que se aumenta el porcentaje de glicerina presente en solución las perlas de hidrogel crecen más lentamente alcanzando el mismo tamaño final hasta un porcentaje de glicerina igual a 60%. Por otro lado, cuando la proporción de glicerina es alta (80%) los hidrogeles se rompen sin alcanzar su máximo tamaño.

Viscoelastic polymer flows in 3D porous media

• Sujit S. Datta[1]

[1] *Chemical and Biological Engineering, Princeton University, Princeton, New Jersey 08544, USA*

Many energy, environmental, industrial, and microfluidic processes rely on the viscous flow of polymer solutions through porous media. In many cases, the macroscopic flow resistance abruptly increases above a threshold flow rate in a porous medium—but not in bulk solution. The reason why has been a puzzle for over half a century. Here, by directly visualizing the flow in a transparent three-dimensional (3D) porous medium, we demonstrate that this anomalous increase is due to the onset of an elastic instability in which the flow exhibits strong spatio-temporal fluctuations reminiscent of inertial turbulence, despite the vanishingly small Reynolds number. We find that the transition to unstable flow in each pore is continuous, arising due to the increased persistence of discrete bursts of instability above an onset flow rate; however, this onset value varies from pore to pore. Thus, unstable flow is spatially heterogeneous across the different pores of the medium, with unstable and laminar regions coexisting. Guided by these findings, we quantitatively establish that the energy dissipated by unstable pore-scale fluctuations generates the anomalous increase in flow resistance through the entire medium. Thus, by linking the onset of unstable flow at the pore scale to transport at the macroscale, our work yields generally-applicable guidelines for predicting and controlling polymer solution flows.

High-power Terahertz sources based on modelocked thin-disk oscillators

• Clara Saraceno,[1] Frank Wulf,[1] Tim Vogel,[1] Samira Mansourzadeh,[1] Celia Millon,[1] Yicheng Wang,[1] Sergei Tomilov,[1] Martin Hoffman[1]

[1] *Photonics and Ultrafast Laser Science, Faculty of Electrical Engineering and Information Technology, Ruhr University Bochum, Germany*

The performance of ultrafast laser systems has seen tremendous progress in the last decades, continuously giving momentum to many fields of science and technology. In particular, the average power of ultrafast sources has seen extremely fast progress. Nowadays, ultrafast laser systems delivering hundreds of watts to kilowatts of average power with pulse energies ranging from hundreds of microjoules to hundreds of millijoules start to be even commercially available, based on optimal geometries such as fiber, slabs and disks. In particular, disk lasers have consistently been at the forefront of latest progress. Their geometry is particularly well-suited for power and energy scaling of ultrashort pulses: the thin, disk-shaped gain medium combined with large mode areas, results both in nearly unrestricted power scalability, and low accumulated nonlinearities. Among these laser systems based on the disk technology, one particular technology has attracted attention as a potential path to achieve the desired level from a simple, one-box, multi-MHz repetition rate oscillator: modelocked thin-disk oscillators can reach hundreds of watts of average power with femtosecond pulses at multi-MHz repetition rate. In this talk, we will discuss ultrafast disk technology, current challenges and research directions, and present one application area which is the generation high average power THz radiation.

Ventaja cuántica en mediciones de transmisión: diversas propuestas experimentales

• Agustina Gabriela Magnoni,[1,2] Muriel Bonetto,[1] Juan Estrada,[3] Miguel Antonio Larotonda,[1,2] Darío Rodrigues[1]

[1] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*
[2] *Departamento de Investigaciones en Láseres y Aplicaciones (CITEDEF) - UNIDEF - CONICET*
[3] *Fermi National Accelerator Laboratory, DOE, EEUU*

En los últimos años, se ha puesto mucha atención sobre cómo la utilización de haces de luz con estadística sub-Poissoniana puede mejorar la precisión obtenida en diversas mediciones ópticas [1]. En particular, la estimación de transmisiones/absorciones (quantum imaging) es uno de los campos más estudiados. En esta presentación detallaremos acerca de posibles implementaciones de este tipo de mediciones utilizando diferentes fuentes de luz: fotones individuales [2] y haces correlacionados (twin beams); y diferentes tipos de detectores de conteo: de umbral y con resolución de número de fotones. Además, se estudia la utilización de las recientemente desarrolladas Skipper-CCDs [3, 4] en la detección, cuyas sobresalientes características permiten estudiar regímenes de luz inalcanzables con otra tecnología. Por último, detallaremos sobre la perspectiva a futuro de implementaciones experimentales. La ventaja cuántica que puede obtenerse con este tipo de implementaciones corresponde a reducir la mejor precisión clásica posible en factores entre 1.5 y 3, aproximadamente.

Referencias:

[1] Berchera, I. Ruo, and Ivo Pietro Degiovanni. Metrologia **56**, 024001 (2019).
[2] Agustina G. Magnoni, Laura T. Knoll, and Miguel A. Larotonda, J. Opt. Soc. Am. B **38**, 2502 (2021).
[3] Tiffenberg, Javier, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **119**, 131802 (2017).
[4] Rodrigues, Dario, *et al.*, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A **1010**, 165511 (2021).

Nuevas ecuaciones de propagación en fibras ópticas y su aplicación en tecnologías cuánticas

• Juan Bonetti,[1] Diego Grosz,[1] Santiago Hernandez[1]

[1] *Grupo de Comunicaciones Ópticas, Departamento de Ingeniería en Telecomunicaciones, GDTyPE, GAIyANN, Centro Atómico Bariloche.*

Durante los últimos años, las fibras ópticas no lineales han sido utilizadas en la realización y prueba experimental de múltiples dispositivos de tecnologías cuánticas. Un claro ejemplo de esto es la manipulación del estado cuántico de la luz, como la conversión de frecuencia de fotones individuales o single-photons, la cual ha permitido resolver la interfaz con memorias cuánticas. Por otro lado, la generación de pares de fotones entrelazados en fibras no lineales ofrece una buena oportunidad para obtener fuentes de fotones individuales o single-photon sources, indispensables para la mayoría de los sistemas de distribución cuántica de claves y computación cuántica. Sin embargo, y a pesar de la evidente relevancia de las fibras no lineales para las tecnologías cuánticas, no existen ecuaciones de propagación de complejidad accesible que permitan predecir, por ejemplo, cómo evoluciona el estado cuántico de un fotón individual en un dispositivo conversor de frecuencia. De hecho, la propagación en fibras no lineales se modela con la conocida generalized nonlinear Schrödinger equation (GNLSE), la cual se limita al estudio de pulsos de luz clásica. Por otro lado, las teorías cuánticas de las fibras no lineales no ofrecen una opción sencilla para calcular la evolución del estado cuántico de la luz, ya que requieren la cuantización del campo electromagnético y de estructura molecular que compone la fibra.
En este trabajo presentamos una nueva ecuación de propagación que permite calcular la evolución del estado cuántico de la luz dentro de una fibra no lineal y que permite modelar varios experimentos relevantes en tecnologías cuánticas. Esta nueva ecuación maestra sólo requiere del conocimiento de los parámetros macroscópicos característicos de la fibra, como la atenuación, la dispersión y el coeficiente de no linealidad. Por otro lado, demostramos que esta ecuación no sólo es compatible con la GNLSE en el límite clásico sino que, también, permite una derivación alternativa de las ecuaciones estocásticas que modelan el ruido cuántico en fibras no lineales. Dentro de las aplicaciones de esta ecuación maestra destacamos la derivación de nuevas ecuaciones de propagación clásicas para fibras no lineales con coeficientes no lineales dependientes de la frecuencia. En estos tipos de fibras, la GNLSE predice resultados físicamente inconsistentes, tales como la no conservación del número de fotones o de la energía. En cambio, las ecuaciones derivadas de la ecuación maestra, que resultan ser versiones modificadas de la GNLSE, no presentan estos inconvenientes.
Finalmente, y a modo de ejemplo, mostramos resultados numéricos de la ecuación maestra que permiten analizar la eficiencia de esquemas novedosos de una single-photon source basada en silicon nanowires decorados con óxido de grafeno, los cuales resultan prometedores para el área de la fotónica integrada.

Comunicaciones Ópticas Satelitales

• Pablo A. Costanzo-Caso,[1] Manuel Fernández,[1] Fabián Rinalde,[1] Leonardo Morbidel,[1] Laureano A. Bulus-Rossini[1]

[1] *Laboratorio de Investigación Aplicada en Telecomunicaciones (LIAT), CNEA. Instituto Balseiro (CNEA-UNCuyo). CONICET CCT Patagonia Norte*

Los sistemas de comunicación óptica se encuentran desde hace décadas consolidados en aplicaciones terrestres y constituyen la columna vertebral que permiten dar soporte a la gran demanda de conectividad y aplicaciones digitales que nos rodean. En los últimos años, las mismas necesidades y requerimientos de ancho de banda se trasladaron a los sistemas aeroespaciales y satelitales, lo que motivó la investigación y el desarrollo de sistemas ópticos en estas aplicaciones. En esta charla se presentarán las principales características de los sistemas de comunicación óptica satelital dependiendo de las características y requerimientos de la misión, como lo son la distancia, el ancho de banda y la potencia transmitida; se hará una comparación con los sistemas de microondas; y se presentarán algunos resultados obtenidos. Finalmente, se mencionará el estado del arte y los principales desafíos en la temática.

Método e instrumento de detección rápida, directa y económica del virus SARS-CoV-2

Guillermo Brinatti Vazquez,[1] Oscar Martínez,[1] V Cappellari,[2] Mariano Dellarole,[2] Pedro Aramendía,[2] • Demian Biasetti,[3] Fabián Videla,[3] Gustavo Torchia,[3] G Bilmes[3]

[1] *Laboratorio de Fotónica (FI -UBA)*
[2] *Centro de Investigaciones en Bionanociencias (CONICET)*
[3] *Centro de Investigaciones Ópticas(CONICET-CIC-UNLP)*

Se desarrolló un nuevo método de detección del virus SARS-CoV-2 que permite la identificación rápida y eficaz de enfermos con capacidad de contagio, a partir de muestras obtenidas por hisopado o eventualmente de saliva. El método desarrollado se basa en la utilización de una sonda molecular consistente en una cadena de ADN que posee un compuesto fluorescente. Al unirse esta sonda al ARN viral se activa la señal de florescencia permitiendo identificar la presencia del virus. Para tal fin se desarrolló un equipo de detección óptica, adaptado al fluoróforo de la sonda. Este instrumento demostró una alta sensibilidad (con un límite de detección comparable al de un microscopio de detección de moléculas individuales), por lo que se prescinde de la replicación viral antes de la medición, la que sí es requerida por la técnica PCR. Adicionalmente, el sistema de detección es comparativamente de bajo costo y permite obtener un resultado en pocos minutos. Ya se ha demostrado el funcionamiento del método en experimentos de laboratorio con extractos inactivados de ARN viral*. Este instrumento permitirá cubrir un nicho de métodos vacante, ya que posibilitará la detección rápida en lugares críticos de alto tránsito como aeropuertos, terminales, escuelas, universidades, etc. y toda otra situación en que se desee establecer un cerco preventivo a la circulación del virus. Por otra parte, permitiría ampliar el espectro de test rápidos que actualmente se utilizan, con un potencial menor costo, ya que reduciría el consumo de insumos importados. El equipo de trabajo se ha asociado además con una empresa nacional de base tecnológica dispuesta a fabricar el instrumento de medición.

*Las muestras de ARN viral fueron provistas por los Dres. Ezequiel Petrillo, y Alberto Kornblihtt, del Instituto de Fisiología, Biología molecular y neurociencias (IFIBYNE- CONICET-UBA)

Desarrollo y fabricación de un dispositivo bio-fotónico (Point of Care) con aplicación al diagnóstico molecular en COVID-19

• Damián Presti,[1,2] Julian Bergier,[2] Marcos Bilen,[2] Gustavo Torchia[1,3]

[1] *Centro de Investigaciones Ópticas, CONICET La Plata - CIC-BA*
[2] *Laboratorio de Ingeniería Genética y Biología Celular y Molecular - Universidad Nacional de Quilmes*
[3] *Departamento Ciencia y Tecnologia, Universidad Nacional de Quilmes - Argentina*

El concepto de Point of Care se centra en la idea de reducir un análisis de laboratorio completo en un dispositivo de pequeño tamaño, que permita la preparación, transporte, reacción y análisis, sin pérdida de eficiencia y precisión de medición y fundamentalmente que pueda realizarse en centros de baja complejidad. Estos sistemas son cada vez más utilizados para el diagnóstico de diversas patologías. En particular, este trabajo está enfocado en la utilización de tecnologías fotónicas y de ingeniería para la construcción y desarrollo de un dispositivo de sensado biológico Point of Care, que permita la detección rápida, eficiente y a bajo costo, de patógenos de alto impacto en el área de salud. Sobre la selección de virus a detectar, esta plataforma al usar la tecnología de detección molecular del tipo PCR, admite una gran variedad de virus objetivos.
Entre de los múltiples virus que han atacado a la región latinoamericana, y en particular a la Argentina, unos pocos son los que se destacan por el gran impacto negativo que han causado en la región. A partir del brote a nivel mundial a finales del 2019 del SARS-CoV-2 (COVID-19), la salud de las personas y las garantías económicas de sus países se han visto gravemente afectadas. En Latinoamérica el impacto negativo ha sido sin precedentes y en particular la Argentina, si bien supo y pudo tomar medidas preventivas, no ha sido ajena a los efectos adversos de la pandemia.
Dentro de este panorama desfavorable en materia de salubridad, es nuestro objetivo desarrollar dispositivos Point of Care capaces de detectar COVID-19 en personas y con la versatilidad de utilizarlo para la detección de otros virus. Para esto utilizamos un conjunto de tecnologías: fabricación 3D, detección fotónica por fluorescencia y metodologías de análisis y diagnóstico biotecnológico, que nos permiten integrar la manipulación, análisis y detección de las muestras en un solo dispositivo que pueda ser utilizado de manera descentralizada en distintos sitios del país.

Propuesta de un modelo de la variación de la calidad visual con la iluminación

• Roberto Francisco Sánchez,[1] Luis Alberto Issolio[1,2]

[1] *Instituto de Investigación en Luz, Ambiente y Visión, Consejo Nacional de Investigaciones Científica y Técnicas (CONICET) y Universidad Nacional de Tucumán.*
[2] *Departamento de Luminotecnia, Luz y Visión, Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología, Universidad Nacional de Tucumán*

Objetivo. Se propone un modelo empírico que explique la reducción en la calidad óptica de la imagen retiniana con el cambio del nivel de iluminación de una escena visual.
Métodos. El modelo se basa en que todo sistema óptico se ve afectado en cierta medida por tres componentes: difracción, aberraciones y difusión. En el caso del ojo humano para pupilas superiores a los 3 mm el efecto de la difracción es considerado despreciable en comparación a los otros factores. Por lo tanto, se propone un modelo en el que el ancho de la imagen de doble paso (FWHM) se puede expresar como una combinación lineal del RMS del frente de onda y de un parámetro de medida de difusión intraocular (FDSI). Para probar el modelo se utilizó un sistema montado en mesa óptica con un sensor de frente de onda tipo Hartmann-Shack para la medida y caracterización de las aberraciones ópticas por medio de los coeficientes de Zernike y del RMS del frente de onda. El sensor está acoplado a un sistema de doble paso que permite medir la imagen retiniana (PSF del ojo), la cual contiene la degradación producida tanto por las aberraciones como por la difusión. A partir de esta PSF se puede obtener la MTF ocular (función de transferencia) y el índice de difusión FDSI. El sistema también cuenta con un campo de adaptación de siete niveles de iluminación que van desde el fotópico (300, 100, 10 y 1 cd/m^2) al mesópico (0.1, 0.01 y 0.005 cd/m^2) y con una cámara para medir el diámetro de la pupila. Se realizaron medidas simultáneas de doble paso, aberraciones y tamaño de pupila en seis sujetos jóvenes voluntarios sin patologías oculares para las siete condiciones de iluminación.
Resultados. A partir de las medidas con el sistema de doble paso se obtuvo el parámetro FWHM de las imágenes registradas en cada sujeto y nivel de iluminación y luego a partir de la MTF de las imágenes de doble paso se determinó la difusión intraocular obteniéndose los valores de FDSI. Por su parte, a través del sensor de Hartmann-Shack se obtuvo el frente de onda en cada condición estudiada de donde se determinaron las aberraciones cuantificadas en términos de RMS. Se pudo observar un comportamiento típico en el RMS que aumenta al aumentar el diámetro de la pupila, por efecto de la disminución de la luminancia de adaptación (ρ = -0.6, p = 0.001). Por otro lado, la difusión intraocular se mantuvo en niveles bajos y constantes en todo el rango de medición (FDSI = 0.42 $\pm$ 0.06), resultado esperable debido a las características de alta transparencia del cristalino propias de la edad de los sujetos voluntarios. Con los datos obtenidos se realizó un ajuste por medio de mínimos cuadrados para obtener los parámetros del modelo: FWHM = a*RMS + b*FDSI, arribándose a un buen ajuste con un R^2 = 0.95, a = 17.5 $\pm$ 2.0 [min de arco/μm] (p $<$ 0.001) y b = 5.9 $\pm$ 0.6 [min de arco] (p $<$ 0.001).
Discusión. El modelo propuesto se ajusta muy bien a los datos experimentales correspondientes a un reducido grupo de sujetos jóvenes. Para ampliar el alcance del mismo se podría medir a personas de diferentes rangos etarios, ya que el cristalino experimenta cambios naturales en su transparencia debido al envejecimiento y también a personas con cataratas donde no solo aumenta la difusión, sino que esta se presenta en patrones no uniformes.

Colangiografía Infrarroja Intraoperatoria

• Patricio Fluxa[1]

[1] *Comisión Nacional de Actividades Espaciales (CONAE) Centro Espacial Teófilo Tabanera*

En el presente trabajo se presenta y analiza el método actual de obtención de imágenes de la vía biliar durante la cirugía de vesícula biliar y se analizan sus problemáticas; luego se propone, desarrolla y pone a prueba en etapas progresivas un método alternativo que evita las problemáticas mencionadas; finalmente se propone un diseño de un instrumento óptico para poder implementarlo en cirugía laparoscópica junto con un análisis de viabilidad. Al inicio del trabajo se presenta una descripción anatómica de las vías biliares en el ser humano, una descripción de la dinámica biliar y de posibles causas que llevan a la necesidad de extraer la vesícula biliar por métodos quirúrgicos. A continuación se describen las razones de la necesidad de un método fiable de obtención de imágenes de los ductos biliares durante la cirugía y las consecuencias de una mala identificación de los mismos. Se incluye también una nota histórica que hace mención a que el método que actualmente se utiliza para la identificación de los ductos biliares fue propuesto y desarrollado en sus inicios por un médico argentino, el Dr. Mirizzi,en nuestro país, también conocida como Mirizzigrafía. Más adelante se describen las nociones físicas fundamentales que dan origen a la posibilidad de la realización de imágenes térmicas, que son las bases del método propuesto en este trabajo. Esta parte describe desde la teoría de la radiación del cuerpo negro, el espectro electromagnético y algunas de sus leyes fundamentales, hasta el desarrollo de tecnologías de detección que hacen posible obtener imágenes analizables. También se describen las ventanas atmosféricas y los materiales que se utilizan para poder hacer lentes en el rango Infrarrojo, y que hacen posble esta observación. Siguiendo con el desarrollo del trabajo, se encuentra la presentación del método alternativo a la Mirizzigrafía para la obtención de imágenes de los ductos biliares durante la cirugía de extracción de la vesícula biliar, el plan de trabajo desarrollado y los resultados que se fueron obteniendo en las etapas de avance de la investigación. Como paso a futuro, se incluye el trabajo de diseño de óptico que se llevó adelante para poder migrar los resultados obtenidos en este trabajo a cirugías mínimamente invasiva, es decir a procedimientos por laparoscopía. Finalmente se presenta un resumen de los datos por etapa, un análisis comparativo y un análisis de las posibles mejoras a realizar en futuras pruebas.

ZnO nanowires for photonic applications

• Frank Güell[1]

[1] *Universitat de Barcelona*

The quest for novel semiconductor materials with improved optoelectronic performance has triggered intense research activities to exploit the great diversity of effects offered by low dimensional systems. In this work, we investigate the influence of the ZnO nanowires (NWs) growth parameters on the ir optical properties . ZnO NW s have been grown by the vapor transport method using Au as catalyst over quartz and SiO 2 /Si substrates with lengths and diameters ranging from 0.2 to 2 m and 40 to 200 nm, respectiv ely. Room temperature absorption spectra show a well defined exciton peak in the ultraviolet. Photoluminescence measurements show two emission bands at room temperature, the exciton emission peak in the ultraviolet, and a very broad emission band in the vi sible range from 420 to 800 nm, which exhibits three distinct peak like contributions in the Green, Yellow and Red at around 520, 590 and 720 nm (2.38, 2.10 and 1.72 eV), respectively. The intensities of these emission bands in the visible change as a func tion of the ZnO NW growth parameters, which correspond to different defect related recombination processes, and were clearly correlated with the quantity and type of defects p resent in the material. We show that the intensity of the broad emission band in the visible increases relative to that of the exciton emission as the ZnO NWs diameter decreases . This result is of great relevance regarding future devices based on these nanostructures since a detailed understanding of the origin of the shell states (sur face states) is mandatory for a precise device design. The highly spatially localized nature of the shell states is a fundamental aspect to control in applications where charge transfer processes play a key role, e.g., detectors such as gas sensors, or even ph otocatalytic activity.

Análisis de líneas registradas mediante técnica Laser-Induced Breakdown Spectroscopy por medio de análisis multivariado

Cristian Adrian D'Angelo,[1,2,3] • Lucila Juliana Martino,[2,3,4] María Paz Bayala,[1,2,3] Mariana Gisele Pereyra[2,3]

[1] *Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires, Calle 526 entre 10 y 11, 1900 La Plata, Argentina*
[2] *CIFICEN (UNCPBA-CICPBA-CONICET), Pinto 399, 7000 Tandil, Argentina*
[3] *Facultad de Ciencias Exactas - Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires*
[4] *Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Tecnológicas (CONICET), Godoy Cruz 2290, Buenos Aires, Argentina*

En este trabajo se presentan los resultados obtenidos de técnicas de análisis multivariado, aplicadas al estudio de líneas espectrales registradas mediante la técnica de espectroscopia de plasmas producidos por láser (LIBS), por medio de un arreglo experimental muy simple y compacto. Estos análisis fueron aplicados a espectros de líneas LIBS de Fe sin discriminación temporal, generados sobre una muestra de acero y con distintas energías láser, entre 5 y 50 mJ por pulso. Los parámetros característicos de estas líneas experimentaron ciertas variaciones de acuerdo a las diferentes energías de láser, que en definitiva están relacionados en forma directa con la temperatura y densidades electrónicas del plasma. Estas variables en estudio estuvieron dadas por la intensidad integrada, intensidad máxima, anchos de perfiles y longitud de onda (corrimientos) de cada una de las líneas. Así también, se calculó otro grupo de parámetros dados por las relaciones de intensidades entre determinadas líneas de Fe II respecto de otras correspondientes a Fe I. Finalmente, el conjunto de estos datos fue analizado mediante técnicas de análisis multivariado, observándose que las líneas tienden a agruparse de acuerdo a ciertos parámetros espectroscópicos que definen a cada transición y grado de ionización. También se pudo verificar un cierto grado de autoabsorción en determinadas condiciones de trabajo.

Avances en el desarrollo de un peine de frecuencias ópticas para aplicaciones en metrología

• Fernando Yapur,[1] Diego Luna,[1] Griselda Mingolla[1]

[1] *Departamento de Óptica y Dimensional, Metrología Física, Instituto Nacional de Tecnología Industrial*

El uso de peines de frecuencias ópticas se ha convertido en una herramienta clave dentro del área de la metrología óptica, con impacto inmediato en el área de metrología dimensional. Actualmente en Argentina el primer eslabón de la cadena de trazabilidad de la unidad de longitud es un láser de He - Ne / I2, (longitud de onda 633 nm, exactitud 2,5 10^{-11}). La implementación de un peine de frecuencias ópticas permitirá obtener un gran número de frecuencias de referencia en distintas longitudes de onda, generando una mejora en la exactitud de las mediciones a lo largo de toda la cadena de trazabilidad, incluyendo la materialización de la unidad de longitud, con impacto inmediato en la industria nacional. La principal característica de los peines de frecuencias, es la posibilidad de generar un espectro óptico discreto con componentes espectrales ancladas a frecuencias de referencia en el rango de las radiofrecuencias. En el caso del peine del INTI, se utiliza como referencia la señal del reloj de Cs, Patrón Nacional de tiempo y frecuencia (frecuencia de 10 MHz con exactitud relativa en 10^{-12}). Se espera que las frecuencias obtenidas a partir del peine, tengan una exactitud relativa de 10^{-11}. El peine de frecuencias montado en este trabajo corresponde al esquema tradicional usado en aplicaciones metrológicas. A partir de un láser de titanio-zafiro bombeado por un láser de ND-Yag de alta potencia, se obtienen pulsos ultracortos que son ingresados en una fibra microestructurada a fin de obtener un espectro ensanchado. En este trabajo, se presentarán los avances en el montaje y estabilización del peine, y se discutirán resultados preliminares obtenidos hasta el momento.

Referencias:

[1] Hänsch, T. W. *Nobel lecture: passion for precision*, Rev. Mod. Phys. **78**, 1297 (2006).
[2] Udem, T., Holzwarth, R., Hänsch, T. W. *Optical frequency metrology*, Nature **416**, 233 (2002).
[3] Fortier, T., Baumann, E. *20 years of developments in optical frequency comb technology and applications*, Commun. Phys. **2**, 1 (2019).

Deconvolución con super-resolución en imágenes de microscopía por superposición de fuentes virtuales

• Micaela Toscani,[1] Sandra Martínez,[2] Oscar E. Martínez[1]

[1] *Laboratorio de Fotónica, IIBM, Facultad de Ingeniería UBA, Conicet*
[2] *Instituto de Investigaciones Matemáticas Luis A. Santaló, Universidad de Buenos Aires, CONICET*

Recientemente desarrollamos un nuevo algoritmo de deconvolución con super-resolución para imágenes únicas denominado SUPPOSe[1]. El método se basa en suponer que la estructura real presente en la imagen (por ejemplo,la distribución de fluoróforos en una muestra fluorescente) puede modelarse como una superposición de N fuentes puntuales dei gual intensidad α, llamadas fuentes virtuales. Este enfoque simplifica el problema de la deconvolución basado en encontrar la intensidad en cada posición y lo reduce a simplemente encontrar las posiciones de las fuentes virtuales, que son variables sin restricciones. Dado que todas las fuentes virtuales tienen la misma intensidad, diferentes niveles de señal en la imagen se reconstruyen acumulando una mayor o menor cantidad de fuentes virtuales en esa zona. Tras estimar la respuesta impulsiva del sistema y habiendo elegido un valor para N y α, hallamos las posiciones de las fuentes virtuales minimizando una función objetivo. Utilizamos un algoritmo genético para resolver el problema de optimización matemática y encontrar las posiciones de las fuentes virtuales. El método se ha aplicado para super-resolver imágenes de microscopía de fluorescencia[2,3]. Pusimos a prueba el método con imágenes sintéticas y experimentales, determinamos el alcance de la exactitud, precisión y resolución del mismo y cómo estos parámetros se modifican ante diferentes relaciones de señal-ruido en la imagen. Las imágenes sintéticas fueron construidas suponiendo una resolución de campo amplio de 236 nm, los resultados obtenidos tras procesar este conjunto de datos demuestran que es posible mediante SUPPOSe lograr resoluciones de 75 nm con una exactitud de 20 nm y una precisión de 10nm.Utilizamos imágenes biológicas experimentales para verificar los resultados de la simulación. Adquirimos imágenes de filamentos de actina presentes en una muestra de células endoteliales de arteria pulmonar bovina (BPAE). Tras procesarlas con SUPPOSe obtuvimos una precisión de 37 nm, ligeramente superiora los valores alcanzados en imágenes sintéticas para los mismos niveles de ruido.

Referencias:

[1] Martínez, S., Toscani, M., Martinez, O. E. *Superresolution method for a single widefield image deconvolution by superposition of point sources*, Journal of Microscopy, **275**, 51 (2019).
[2] Toscani, M., Martínez, S., Martínez, O. E. *Single image deconvolution withsuper-resolution using the suppose algorithm*, In Single Molecule Spectroscopy and Superresolution Imaging XII **10884**, 1088415 (2019).
[3] Toscani, M., Martínez, S. *Solving the boundary artifact for the enhanced deconvolution algorithm SUPPOSe applied to fluorescence microscopy*, Computer Optics **45**, 418 (2021).

Detección de bordes y superficies en imágenes de microscopía de fluorescencia con resolución mejor que el límite de difracción

• Guillermo Brinatti Vazquez,[1,2] Sandra Martínez,[1,3] Oscar E. Martínez[1,2]

[1] *Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas*
[2] *Laboratorio de Fotónica, Instituto de Ingeniería Biomédica, Unviersidad de Buenos Aire*
[3] *Departamento de Matemática e IMAS UBA-CONICET, FCEyN, UBA*

Cuerpo vacioSe presenta el método de deconvolución SUPPOSe Edge, diseñado para la detección de bordes en imágenes de microscopía de fluorescencia, así como su generalización a tres dimensiones SUPPOSe 3Dge, que permite detectar superficies en imágenes volumétricas, recuperando en ambos casos detalles que se encuentran por debajo de la resolución instrumental. El mismo está basado en el método SUPPOSe[1], que reformula el problema de la deconvolución en un problema de cuadrados mínimos a partir de aproximar la distribución de intensidad de la imagen por una suma de fuentes puntuales de igual brillo. Para el caso de objetos con bordes bien definidos, es posible realizar una adaptación vectorial de SUPPOSe, donde ahora aproximaremos no la imagen sino su gradiente por una suma de fuentes puntuales ordenadas sobre un contorno o una superficie.
Para el caso 2D, se obtuvieron resultados tanto simulados como experimentales que demuestran la capacidad del método para recuperar las formas de objetos con tamaños por debajo del límite de difracción, así como también distinguir dos objetos cuya separación es menor a la resolución instrumental y por lo tanto se observan como uno solo [2].
Para el caso 3D, se obtuvieron resultados en imágenes simuladas, donde se observa que el método recupera información sobre la forma de objetos cuyo tamaño es menor a la resolución axial. Se compararon estos resultados con el método de detección de bordes Canny aplicado sobre una deconvolución de Richardson-Lucy, mostrando que el método SUPPOSe 3Dge es mucho más preciso y que recupera información sobre la forma del objeto que no está presente en las soluciones estándar.

Referencias:

[1] Martínez, S., Toscani, M., & Martinez, O. E. *Superresolution method for a single widefield image deconvolution by superposition of point sources*, Journal of Microscopy **275**, 51 (2019).
[2] Brinatti Vazquez, G. D., Martínez, S., & Martínez, O. E. *Super-resolved edge detection in optical microscopy images by superposition of virtual point sources*, Optics Express **28**, 25319 (2020).

Teoría del Constructor e Irreversibilidad en sistemas cuánticos: teoría y experimento

• Laura Knoll[1]

[1] *Istituto Nazionale di Ricerca Metrologica (INRIM), Torino, Italia.*

La cuestión de la irreversibilidad en un universo regido por leyes de inversión temporal es un problema central de la física. En este trabajo, discutimos por primera vez cómo la irreversibilidad puede surgir dentro del marco de la teoría del constructor, propuesto recientemente. Aquí la irreversibilidad se expresa como el requisito de que una tarea sea posible, mientras que su inversa no lo es. En particular, demostramos que esta irreversibilidad es compatible con la evolución unitaria de un sistema cuántico, mediante un modelo específico basado en el homogeneizador cuántico universal, realizado experimentalmente con qubits codificados en fotones únicos.

Acción cuántica en el espacio-tiempo

• Nahuel Diaz,[1] Juan M. Matera,[1] Raúl Rossignoli[1,2]

[1] *Instituto de Física de La Plata, CONICET*
[2] *Comisión de Investigaciones Científicas (CIC), La Plata (1900)*

Se presenta una formulación de la mecánica cuántica en un espacio de Fock extendido que aplica una estructura de producto tensorial al tiempo [1]. En este escenario, la dinámica de teorías físicas queda determinada por una versión cuántica de la acción clásica. La diagonalización de dichos operadores de acción permite reobtener las predicciones de la mecánica cuántica convencional y revela una equivalencia unitaria extendida entre todas las teorías físicas. Las correlaciones cuánticas y los efectos de coherencia entre instantes de tiempo y entre distintas teorías físicas adquieren un significado riguroso, de acuerdo a la estructura temporal de estados físicos. También surgen conexiones con esquemas relativistas modernos y la formulación de Feynman de la mecánica cuántica.

Referencias:

[1] Diaz, N. L., J. M. Matera, and R. Rossignoli. *Spacetime quantum actions*, Phys. Rev. D **103**, 065011 (2021).

Estrategia de control superadiabatica en la manipulación de electrones en cadenas de puntos cuánticos

• Sergio Gomez,[1,2] Estefania Rus[1]

[1] *Instituto de Modelado e Innovación Tecnológica (CONICET - Universidad Nacional del Nordeste)*
[2] *Dep. Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Catamarca*

Presentamos un protocolo basado en los atajos a la adiabaticidad para la manipulación de un electrón en una cadena de puntos cuánticos de longitud arbitraria. El diseño implica valores particulares de los acoplamientos, y en el mismo se presentan manipulaciones globales del sistema mediante campos eléctricos con dependencia tipo Landau Zener modificada y compuertas de gate. Mediante el protocolo podemos controlar la fidelidad de manera arbitraria, en tiempos del orden de los nanosegundos. Hemos analizado también los efectos de mecanismos tipo spin-flip como el espin orbita de rashba , ademas de defectos de diseño.

Entrelazamiento de muchos cuerpos en sistemas fermiónicos

Marco Di Tullio,[1] Nicolás Gigena,[1] • Raul Dante Rossignoli[1,2]

[1] *Instituto de Física La Plata, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP - CONICET*
[2] *Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires*

Se describe una representación bipartita general de un estado puro arbitrario de N fermiones indistinguibles, basada en estados de M y $N-M$ fermiones. La representación está directamente relacionada con las matrices densidad reducidas de M y $N-M$ cuerpos, que poseen el mismo espectro en estos estados. Se analiza también la descomposición de Schmidt asociada. El concepto de entrelazamiento fermiónico de M cuerpos emerge naturalmente de esta representación, y generaliza el entrelazamiento de un cuerpo. Se derivan relaciones de mayorización que satisfacen estas matrices densidad bajo ciertas operaciones, que implican propiedades de monotonía de la entropía de M cuerpos asociada. Se muestra asimismo que dicha entropía proporciona una cota superior del entrelazamiento bipartito estándar generado por una cierta clase de operaciones. Se examina finalmente el espectro de matrices densidad de M cuerpos en ciertos estados fuertemente correlacionados.

Dispositivos cuánticos como punto de encuentro entre la termodinámica y la inteligencia artificial

• Natalia Ares[1]

[1] *Universidad de Oxford, Reino Unido*

El desarrollo de dispositivos cuánticos, que pueden ser operados con gran precisión y en tiempos tan cortos como una decena de nanosegundos, abre posibilidades tanto para el desarrollo de tecnologías novedosas como para contestar preguntas fundamentales en la mecánica cuántica y la termodinámica. En este contexto, la capacidad adquirida recientemente de medir el movimiento de membranas de espesor nanométrico excitadas por fluctuaciones eléctricas nos ha permitido estimar el costo termodinámico de medir el paso del tiempo [1]. En dispositivos basados en nanotubos de carbono suspendidos entre dos pilares y enfriados a temperaturas en el orden de los miliKelvin encontramos que el transporte de electrones en este cable semiconductor, de un par de nanómetros de diámetro, está fuertemente acoplado a variaciones en su desplazamiento [2]. Esta interacción nos esta permitiendo estudiar máquinas térmicas en las que el "gas" es uno o dos electrones y el "pistón" es el movimiento del nanotubo. Por otro lado, estos avances enfrentan un reto: el control de estos dispositivos se está volviendo cada vez más difícil. La dimensión del espacio de parámetros a explorar para operar estos dispositivos cuánticos y optimizarlos crece rápidamente a medida que los mismos se vuelven más y más complejos. Esta es la razón por la cual desarrollamos algoritmos de inteligencia artificial capaces de caracterizar y calibrar dispositivos cuánticos de manera completamente automática y con una eficiencia superior a la de los humanos [3]. A su vez, estos dispositivos nos ofrecen una plataforma para explorar el significado de aprender en el contexto de mecánica cuántica y para desarrollar nuevos dispositivos con la capacidad de aprender.

Referencias:

[1] A. Pearson *et al.*, Phys. Rev. X **11**, 021029 (2021).
[2] F. Vigneau *et al.*, arXiv
[3] N. Ares. Comment, Nat. Rev. Mater. **6**, 870 (2021)

Estimación de distribuciones de probabilidad utilizando computadoras cuánticas

• Diego Tielas,[1,2] Federico Holik,[3] Marcelo Losada,[4] Lorena Rebon[1,2]

[1] *Instituto de Física de La Plata, CONICET - Departamento de Física, FCE, UNLP*
[2] *Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería, UNLP*
[3] *Instituto de Física de La Plata, CONICET*
[4] *Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación, Universidad Nacional de Córdoba - CONICET*

Poder calcular eficientemente la función de distribución de una variable aleatoria de un sistema clásico, o la matriz densidad que describe el estado de un sistema cuántico, a partir de un conjunto de mediciones sobre el sistema, son tareas fundamentales en las distintas aplicaciones de la teoría de la información. A medida que avanza el desarrollo de las distintas tecnologías cuánticas, y es posible manipular coherentemente sistemas cuánticos con un número cada vez mayor de qubits, resulta natural utilizarlas como soporte de las técnicas de estimación, tanto para resolver el problema de cálculo inicial, como para la subsecuente obtención de observables del sistema. Cuando los sistemas a estudiar son suficientemente complejos, la situación que usualmente se presenta es la de contar sólo con parte de la información necesaria para determinar unívocamente la función de distribución, o su matriz densidad. En este escenario de información incompleta el principio de máxima entropía (MaxEnt), introducido por E. T. Jaynes en el marco del abordaje informacional de la mecánica estadística [1, 2], es una de las técnicas de inferencia más utilizadas. Este principio permite obtener una matriz densidad de un sistema cuántico [3], o la función de distribución de un sistema clásico, que es compatible con la información que se posee del sistema, y al mismo tiempo, es la menos sesgada respecto de la información que se desconoce. En este trabajo presentamos la implementación del método de estimación de MaxEnt, en un sistema híbrido formado por sistemas de cómputo cuántico y clásico. Como prueba de concepto se mostrarán los resultados obtenidos de la estimación de la matriz densidad de sistemas de dos y tres qubits, y de la función de distribución de problemas clásicos simples.

Referencias:

[1] E. Jaynes, *Information Theory and Statistical Mechanics*, Phys. Rev. **106**, 620 (May 1957).
[2] E. Jaynes, *Information Theory and Statistical Mechanics II*, Phys. Rev. **108**, 171 (Oct 1957).
[3] M. Losada, F. Holik, C. Massri, and A. Plastino, Quantum Inf. Process. **18**, 293 (2019).

Integrales de caminos para caracterizar y controlar efectos de decoherencia no-estacionarios mediante un sensor cuántico

• Martin Kuffer,[1,2,3] Analía Zwick,[1,2] Gonzalo A. Álvarez[1,2,3]

[1] *Centro Atomico Bariloche - Comisión Nacional de Energía Atómica*
[2] *Instituto de Nanociencia y Nanotecnología, CNEA, CONICET, Centro Atómico Bariloche, Av. Bustillo 9500 (8400) S. C. Bariloche, Argentina.*
[3] *Instituto Balseiro - Universidad Nacional de Cuyo*

El procesamiento confiable de la información cuántica es un hito clave para el desarrollo de tecnologías cuánticas. Para ello es necesario caracterizar fuentes de decoherencia inducidas por sistemas que se encuentran fuera de equilibrio, cuya información pueda ser extraída por sensores cuánticos. Ésta caracterización es además necesaria para diseñar el control óptimo de dispositivos cuánticos para mitigar la pérdida de su información cuántica. En este trabajo, introducimos un formalismo basado en integrales de caminos para caracterizar ruidos fluctuantes no-estacionarios que generan decoherencia en un sensor cuántico [1]. Encontramos la solución para el decaimiento por decoherencia generado por procesos Gaussianos no-estacionarios. El resultado obtenido extiende la validez de la fórmula universal para el decaimiento por defasaje de sistemas cuánticos abiertos que depende solo de la superposición entre la densidad espectral del ruido ambiente y de una función filtro generada por el control ejercido sobre sistema cuántico. Esto permite aplicar técnicas de desacoplamiento dinámico, diseñadas para entornos estacionarios, a entornos no-estacionarios y medir su densidad espectral. La extensión al caso de ruido no-estacionario, se basa en que su densidad espectral queda definida por la inversa de un operador kernel del ruido fluctuante y de su base de autovectores, que define los modos del ruido. Mostramos también resultados relevantes para una amplia clase de ruidos no-estacionarios: los ruidos locales en el tiempo, donde las funciones de correlación del ruido están determinadas por restricciones a las derivadas de los caminos posibles del ruido fluctuante. Discutimos propiedades espectrales y de no Markovianeidad junto con la implementación del formalismo para tratar entornos que están fuera de equilibrio como consecuencia de un quench y un ruido cuyas fluctuaciones ocurren sólo cerca de un instante de tiempo. Mostramos que nuestros resultados proveen una tecnología cuántica para sondear las propiedades espectrales y mitigar los efectos de decoherencia de entornos fuera de equilibrio, no-estacionarios.

Referencias:

[1] Martin Kuffer, Analia Zwick, and Gonzalo A. Alvarez, *Path integral framework for characterizing and controlling decoherence induced by non-stationary environments on a quantum probe.* En referato 2021.

Nuevos experimentos de RMN sobre dinámica y decoherencia en sistemas de muchos cuerpos

• Ana Karina Chattah,[1] Claudia M. Sánchez,[2] Horacio M. Pastawski[1]

[1] *Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación, Universidad Nacional de Córdoba, Instituto de Física Enrique Gaviola CONICET-UNC*
[2] *Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación, FAMAF-UNC, Argentina*

Buscando identificar y compensar las fuentes de decoherencia en sistemas de muchos cuerpos lejos del estado fundamental, la variada familia de ecos de Loschmidt (LE) se convirtió en una herramienta invaluable en varias técnicas experimentales. A través de los LE de RMN hemos formulado la hipótesis central de irreversibilidad, afirmando que la escala de tiempo de la decoherencia, T_3, es proporcional a la escala de tiempo de las interacciones que invertimos, T_2. Para comprobar esto implementamos dos esquemas experimentales basados en Hamiltonianos efectivos de Floquet donde la fuerza del acoplamiento espín-espín dipolar efectivo, es decir, $1/T_2$, se reduce en forma variable con un factor de escala k. Sorprendentemente, observamos la superposición de los ecos de Loschmidt normalizados para distintos valores de k, manifiestando que la dinámica intrínseca domina a los modos de perturbación, incluso cuando el eco de Loschmidt está diseñado para revertir esa dinámica. Así, en el límite donde las interacciones reversibles dominan a las perturbaciones, el LE decae dentro de una escala de tiempo, T_3 que confirma la aparición de un régimen independiente de perturbaciones dentro de la hipótesis central de irreversibilidad.

Algoritmos variacionales para computación cuántica en la era NISQ

• Marco Cerezo[1]

[1] *Los Alamos National Laboratory*

Los rápidos avances y desarrollos de las computadoras cuánticas NISQ (por las siglas en inglés Noisy Intermediate-Scale Quantum), han dado pie a la posibilidad de utilizarlas para realizar tareas de machine learning que están más allá de las capacidades de los superordenadores clásicos. En este contexto, las redes neuronales cuánticas (QNN) y los algoritmos variacionales cuánticos (VQA) son los principales candidatos para darle un uso práctico a los ordenadores NISQ. Tanto las QNN como los VQA entrenan los parámetros de una red neuronal -o de un circuito cuántico- para minimizar una función de costo que codifica la información de un problema. Actualmente, se han propuesto VQAs para todas aquellas aplicaciones en las cuales un ordenador cuántico podría obtener una ventaja computacional. En la primera parte de esta charla se discutirán los fundamentos teóricos de la computación cuántica en computadoras NISQ. Luego, en la segunda parte se presentarán algunas de las dificultades que pueden surgir al entrenar los parámetros de las QNNs. Por ejemplo, los llamados "Barren Plateaus", donde los gradientes de la función de costo se anulan exponencialmente con el tamaño del sistema cuántico.

Referencias:

[1] M. Cerezo *et al.*, *Variational Quantum Algorithms*, Nat. Rev. Phys. **3**, 625 (2021). arXiv

[2] M. Cerezo *et al.*, *Cost Function Dependent Barren Plateaus in Shallow Parametrized Quantum Circuits*, Nat. Commun. **12**, 1791 (2021). arXiv

Probing particle-particle correlation in harmonic traps with twisted light

• Johanna I. Fuks,[1,2,3] Guillermo Quinteiro,[3,4] Heiko Appel,[5] Pablo Tamborenea[1,3]

[1] *Departamento de Física e Instituto de Física de Buenos Aires (IFIBA, UBA-CONICET), Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires.*
[2] *Instituto de Física de Buenos Aires (IFIBA, UBA-CONICET)*
[3] *CONICET*
[4] *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura - Universidad Nacional del Nordeste*
[5] *Max Planck Institut Hamburg*

We explore the potential of twisted light as a tool to unveil many-body effects in parabolically confined systems. According to the Generalized Kohn Theorem, the dipole response of such a multi-particle system to a spatially homogeneous probe is indistinguishable from the response of a system of non-interacting particles. Twisted light however can excite internal degrees of freedom, resulting in the appearance of new peaks in the even multipole spectrum which are not present when the probe is a plane wave. We also demonstrate the ability of the proposed twisted light probe to capture the transition of interacting fermions into a strongly correlated regime in a one-dimensional harmonic trap. We report that by suitable choice of the probe's parameters, the transition into a strongly correlated phase manifests itself as an approach and ultimate superposition of peaks in the second order quadrupole response. These features, observed in exact calculations for two electrons, are reproduced in adiabatic Time Dependent Density Functional Theory simulations.

¿Qué tan controlable es la dinámica de la información cuántica?

• Gonzalo A. Álvarez,[1,2,3] Federico D. Dominguez,[3] M. Cristina Rodriguez,[1,3] Martin Kuffer,[1,2,3] Analia Zwick[2,3]

[1] *Instituto Balseiro - Universidad Nacional de Cuyo*
[2] *Instituto de Nanociencia y Nanotecnología, CNEA, CONICET, Centro Atómico Bariloche, Av. Bustillo 9500 (8400) S. C. Bariloche, Argentina.*
[3] *Laboratorio de Espectroscopia e Imágenes por Resonancia Magnética Nuclear, Departamento de Física Médica, Centro Atómico Bariloche, CNEA, CONICET*

El procesamiento confiable de la información cuántica para desarrollar tecnologías cuánticas requiere el control preciso de sistemas de muchos cuerpos fuera de equilibrio [1,2]. Esta es una tarea muy desafiante ya que la fragilidad de los estados cuánticos a las perturbaciones externas aumenta con el tamaño del sistema. En este trabajo mostramos una serie de simulaciones cuánticas implementadas con Resonancia Magnética Nuclear que permiten cuantificar cuánto se aparta una dinámica cuántica ante perturbaciones en el Hamiloniano de control [3-5]. Determinamos "out-of-time order correlations" (OTOCs) [1,6] que cuantifican cuanto se aparta la dinámica cuántica controlada idealmente de una dinámica realista que contiene imperfecciones [4,5]. Se observa que la tasa de decaimiento de la fidelidad de esta dinámica se incrementa con el número efectivo e instantáneo K de qubits activos, siguiendo una ley de potencia K^{α}. Se observan cambios en la ley de escala de la decoherencia que definen la fragilidad del control cuántico, manifiesta en el exponente α. Desarrollamos un modelo para caracterizar éstas OTOCs y la fragilidad de la dinámica cuántica, consistente con las observaciones experimentales. Estos resultados indican que el control confiable de sistemas cuánticos grandes podría ser factible en condiciones realistas, si las perturbaciones pueden mantenerse por debajo de este umbral crítico.

Referencias:

[1] R.J. Lewis-Swan, A. Safavi-Naini, A.M. Kaufman, and A.M. Rey. *Dynamics of quantum information.* Nat. Rev. Phys. **1**, 627 (2019).
[2] M. Kuffer, A. Zwick, and G.A. Álvarez. *Path integral framework for characterizing and controlling decoherence induced by non-stationary environments on a quantum probe.* En referato (2021).
[3] G.A. Álvarez, D. Suter, and R. Kaiser. *Localization-delocalization transition in the dynamics of dipolar-coupled nuclear spins.* Science **349**, 846 (2015).
[4] F.D. Dominguez, M.C. Rodriguez, R. Kaiser, D. Suter, and G.A. Alvarez. *Decoherence scaling transition in the dynamics of quantum information scrambling.* Phys. Rev. A **104**, 012402 (2021).
[5] F.D. Domínguez, and G.A. Álvarez, *Dynamics of quantum information scrambling under decoherence effects.* arXiv:2107.03870 (2021).
[6] B. Swingle. *Unscrambling the physics of out-of-time-order correlators.* Nat. Phys. **14**, 988 (2018).

Resumen vacio

• Alejandro Díaz-Caro[1,2]

[1] *CONICET-Universidad de Buenos Aires. Instituto de Investigación en Ciencias de la Computación. Buenos Aires, Argentina.*
[2] *Departamento Ciencia y Tecnologia, Universidad Nacional de Quilmes - Argentina*

La lógica matemática y los fundamentos de los lenguajes de programación (cálculo lambda) tienen una conexión muy fuerte conocida como isomorfismo de Curry-Howard.
Desde la irrupción de la computación cuántica en la física, las ciencias de la computación entraron a aportar sus técnicas en el estudio de los fundamentos de la física cuántica. En particular, la búsqueda de una lógica cuántica, iniciada por Birkhoff y von Neumann en los años 30, ha tomado un nuevo rumbo en la última década, buscando su conexión con la computación cuántica, tratando de extender el isomorfismo de Curry-Howard.
En esta charla comenzaré por una introducción al isomorfismo de Curry-Howard, y haré un racconto de los intentos por definir un cálculo lambda cuántico que pueda dar luz a una lógica cuántica fundamentada desde la computación cuántica.

Fluctuación y disipación en evoluciones cuánticas abiertas sin memoria

• Fabricio Toscano,[1] Gustavo M. Bosyk,[2,3] Steeve Zozor,[4] Mariela Portesi[2]

[1] *Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ), Brasil*
[2] *Instituto de Física La Plata, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP - CONICET*
[3] *Università degli Studi di Cagliari*
[4] *GIPSA-Lab, CNRS - Université Grenoble Alpes, France*

La tasa de entropía de von Neumann para sistemas cuánticos abiertos se escribe, en general, en términos de la tasa de producción de entropía y del flujo de entropía, que abarcan la segunda ley de la termodinámica. Cuando la evolución del sistema cuántico abierto corresponde a un semigrupo dinámico cuántico, encontramos una descomposición del generador infinitesimal de la dinámica cuyo primer término corresponde al generador infinitesimal de difusión en la dinámica, y el segundo término es el generador infinitesimal de disipación. El primer término de la descomposición permite relacionar la tasa de entropía de von Neumann con la información de Fisher cuántica basada en divergencias, para todo tiempo, midiendo así la contribución de ruido en la dinámica. El segundo término mide la contribución de las fuerzas disipativas. Aplicando esta descomposición a la tasa de entropía de von Neumann de los canales cuánticos Gaussianos que son semigrupos dinámicos, nuestra descomposición conduce al análogo cuántico de la identidad clásica generalizada de de Bruijn. Para semigrupos dinámicos cuánticos generales nuestra descomposición también representa una identidad de de Bruijn cuántica. Esta identidad de de Bruijn es una alternativa a la descomposición de la tasa de entropía de von Neumann basada en un abordaje termodinámico, expresando así la relación de fluctuación - disipación en ese tipo de canales cuánticos. Finalmente, desde esta perspectiva, analizamos cómo surge la estacionariedad en semigrupos dinámicos cuánticos.

Vector de coherencia generalizado y transformaciones de coherencia

• Marcelo Losada,[1] Gustavo Martín Bosyk,[2,3] César Massri[4,5]

[1] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*
[2] *Università degli Studi di Cagliari*
[3] *Instituto de Física de La Plata, CONICET*
[4] *Grupo de Matemática Aplicada, Departamento de Matemática, Universidad CAECE*
[5] *Instituto de Investigaciones Matemáticas Luis A. Santaló, Universidad de Buenos Aires, CONICET*

Un problema central de toda teoría de recursos es caracterizar cuáles son las conversiones admisibles entre recursos mediante operaciones libres de la teoría. En esta charla discutiremos este problema en el contexto de la teoría de recursos de la coherencia cuántica. Para ello introduciremos la noción de vector de coherencia generalizado de un estado cuántico arbitrario. Demostraremos que esta noción permite caracterizar completamente a los estados incoherentes, así como a los máximamente coherentes. A su vez, aprovechando la estructura del reticulado de mayorización, obtendremos una condición necesaria para la conversión de estados cuánticos mediante operaciones incoherentes. Finalmente introduciremos una familia de cuantificadores de coherencia basada en el vector de coherencia generalizado.

Simulación de enfriamiento Doppler de un nanocristal dopado de iterbio

• Milton Katz[1,2]

[1] *Laboratorio de Iones y Atomos Frios - Departamente de Física - Universidad de Buenos Aires*
[2] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*

En el trabajo se realizaron simulaciones del enfriamiento de partículas atrapadas en una trampa de Paul. En primer lugar, se simuló un experimenento conocido con iones de calcio para comprobar el funcionamiento del sistema desarrollado, en segundo lugar se simuló el enfriamiento de nanocristales con el fin de determinar si era posible llegar al orden de los microkelvin como se proponía en trabajos anteriores. En nanopartículas se observaron enfriamientos extremadamente lentos, por lo que se determinó la imposibilidad de llegar a los límites deseados con enfriamiento Doppler. Para realizar estas simulaciones se utilizó el software de simulación de dinámica molecular LAMMPS, para lo cual algunas de sus funciones tuvieron que ser adaptadas a las necesidades del trabajo. Por otro lado y en base a la librería de python, pylio, se generó un sistema que permite, desde python, interactuar con LAMMPS, ejecutar simulaciones y a su vez tomar los datos para ser analizados o almacenados. Éste sistema servirá para futuras simulaciones de partículas en trampas y quedará disponible para futuros trabajos.

Control quiral de los campos dispersados al circundar cuasi adiabáticamente un punto excepcional

• Lucas J. Fernandez-Alcazar[1,2,3]

[1] *Wave Transport in Complex Systems Lab, Department of Physics, Wesleyan University, Middletown, CT-6459, USA*
[2] *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura - Universidad Nacional del Nordeste*
[3] *Instituto de Modelado e Innovación Tecnológica, CONICET-UN del Noreste*

Los Puntos Excepcionales son degeneraciones espectrales que ocurren en Hamiltonianos no Hermitianos cuando dos (o más) autovalores y sus correspondientes autovectores coalescen para valores específicos de los parámetros del sistema que controlan el Hamiltoniano. Cuando estos parámetros de control son barridos lentamente formando un ciclo que encierra al punto excepcional, uno de los estados evoluciona hacia el segundo [1-4]. Este fenómeno se conoce como inversión adiabática del estado (adiabatic state flip). Por el contrario, este no es el caso para el otro estado, que retorna nuevamente a si mismo [3,4]. En consecuencia, durante una variación cuasi adiabática de los parámetros alrededor de un punto excepcional, el estado final es siempre el mismo y no es afectado por la preparación inicial. Resulta que el único modo de alterar el estado final es cambiar la dirección del ciclo alrededor del punto excepcional: Recorrer el ciclo en sentido horario lleva a un estado final diferente que haciéndolo en sentido antihorario. Tal inversión quiral del estado ha sido experimentalmente verificada en guías de microondas y resonadores opto-mecánicos [1,2] y tiene gran potencial para aplicaciones tecnológicas, como protocolos para interruptores o bien transferencia de energía [2].
En este trabajo, investigamos el concepto de inversión quiral del estado en un nuevo marco, asociado a la dispersión de excitaciones. En particular, conectamos puertos al sistema modulado cuasi adiabáticamente e investigamos la dinámica asociada a las señales salientes. Específicamente, mostramos que, usando teoría de modos acoplados así como simulaciones realistas en un sistema de circuitos electrónicos (cuyas ecuaciones dinámicas puede ser mapeadas a una ecuación tipo Schrödinger), uno puede lograr un control quiral de los campos dispersados al circundar cuasi adiabáticamente un punto excepcional [5]. Remarcablemente, mostramos que tal fenómeno está dominado por el así llamado tiempo de vida media del proceso de dispersión – una escala nueva en este marco que cuantifica el tiempo que las excitaciones pasan dentro del sistema.

Referencias:

[1] J. Doppler, A. A. Mailybaev, J. Böhm, U. Kuhl, A. Girschik, F. Libisch, T. J. Milburn, P. Rabl, N. Moiseyev, and S. Rotter, *Dynamically encircling an exceptional point for asymmetric mode switching*, Nature **537**, 76 (2016).
[2] H. Xu, D. Mason, L. Jiang, and J. G. E. Harris, *Topological energy transfer in an optomechanical system with exceptional points*, Nature **537**, 80 (2016).
[3] R. Uzdin, A. Mailybaev, and N. Moiseyev, *On the observability and asymmetry of adiabatic state flips generated by exceptional points*, J. Phys. A: Math. Theor. **44**, 435302 (2011).
[4] D. Hallpern, H. Li, and T. Kottos, *Floquet protocols of adiabatic state flips and reallocation of exceptional points*, Phys. Rev. A **97**, 042119 (2018).
[5] L. J. Fernández-Alcázar, H. Li, F. Ellis, A. Alú, and T. Kottos. *Robust scattered fields from adiabatically driven targets around exceptional points*, Phys. Rev. Lett. **124**, 133905 (2020).

Aplicación de Junturas Josephson en sistemas de Arrays Josephson Programables aplicados a la Metrología Eléctrica

• Estefania Evelyn Ruth Luna,[1,2] Ricardo Javier Iuzzolino[2]

[1] *Instituto de la Calidad Industrial - Universidad Nacional de San Martín*
[2] *Instituto Nacional de Tecnología Industrial*

El descubrimiento del efecto Josephson en 1962 por Brian Josephson, introdujo un amplio campo de aplicación de los superconductores y de las denominadas junturas Josephson. El progreso en la tecnología de micro-fabricación fue un factor importante en el desarrollo de los arreglos de junturas Josephson, que contienen miles de decenas de dichas junturas, conectadas en serie y fabricadas con tecnología de película delgada. En aplicaciones de metrología eléctrica los arreglos más utilizados son los de juntura SIS (superconductor-aislante-superconductor), SINIS (superconductor-aislante-normal-aislante-superconductor) y SNS (superconductor-normal-superconductor).
Los sistemas Josephson conformados por estos arreglos de junturas juegan un papel esencial en la metrología eléctrica fundamental, dada la dependencia en la tensión generada por el arreglo de junturas Josephson de constantes fundamentales, la constante de Planck y la carga eléctrica elemental, y su vinculación con la unidad de tiempo, el segundo, a través de una frecuencia de microondas aplicada que se obtiene a partir de un reloj atómico. Su aplicación más importante es la realización de la unidad de tensión eléctrica, el volt, del Sistema Internacional de Unidades, SI.
En este trabajo se presentaran resultados de la aplicación de las junturas SNS a sistemas Josephson Programables para la generación de señales continuas y alternas de alta exactitud.
Contacto: Estefania Luna, estefanialuna@inti.gob.ar

Aportes de la física en el desarrollo de bioadsorbentes para descontaminar agua

• Eduardo Rubén Padilla ,[1] Roberto Daniel Perez ,[2] Carmen Maturano ,[1] Ana Victoria Delfino ,[1] Ana Ferrari ,[1] Guillermina Azucena Bongiovanni [1]

[1] *Instituto de Investigación y Desarrollo en Ingeniería de Procesos, Biotecnología y Energías Alternativas - CONICET - UNCo*

[2] *Instituto de Física Enrique Gaviola (CONICET-UNC)*

Antecedentes y resultados previos La contaminación del agua con metales pesados representa un riesgo serio para la salud porque son elementos tóxicos, generalmente cancerígenos cuando son consumidos en dosis bajas, pero en forma crónica. Uno de los más relevantes es el arsénico (As) porque alrededor de 4 millones de argentinos (más de 200 millones en el mundo, en más de 100 países [1]) consumen agua contaminada con este tóxico. Existen varios métodos de remediación, pero son costosos, requieren personal entrenado o utilizan polímeros sintéticos que resultan también tóxicos. Además, suelen generar grandes volúmenes de desechos químicos de difícil disposición final. En los últimos años hemos estudiado la bioacumulación de As en microorganismos extremófilos autóctonos utilizando diversas técnicas que permiten identificar y cuantificar simultáneamente, numerosos elementos en las muestras. Mediante medidas de la Emisión de Fluorescencia en muestras irradiadas con Rayos X (micro-SRXRF, STXRF-XANES, TXRF, micro-XRF) encontramos que los microorganismos colectados en su hábitat contienen 31 μg de As por g de peso seco en promedio, con una alta capacidad de retener también Cr, Mn, Fe y Sr [2,3]. Los análisis por SRXRF-XANES realizados en el Laboratorio Nacional de Luz Sincrotrón, Campinas, Brasil sugirieron que gran parte del As ambiental (en agua) es retenido en la cubierta externa [3]. Objetivos Optimizar la proliferación in vitro de microrganismos extremófilos de Neuquén para la obtención de biopolímeros con capacidad de adsorber contaminantes acuosos. Materiales y métodos Cultivo in vitro de microorganismos en diferentes condiciones; análisis morfológicos y por coloración usando microscopio óptico y de fluorescencia; Fluorescencia de Rayos X (XRF y TXRF) realizados en el IFEG para estudiar bioacumulación de As y metales pesados, así como cuantificación de estos elementos en agua. Resultados Observamos, que en su hábitat, estos microorganismos presentan diferente coloración, desde blancas a verde oscuro. Los estudios realizados por microscopía indicaron que se trata principalmente de cianobacterias, las cuales presentan una pared celular que sería la responsable de retener los contaminantes ambientales . Gracias a los estudios por Fluorescencia de Rayos X realizados en el IFEG (MDL 0.25 μg/g de As) se encontró que las colonias más oscuras poseen mayor capacidad de acumulación de As (hasta 50 μg de As por g de peso seco). Observamos que el pH, temperatura e iluminación afectan el crecimiento in vitro de estos microorganismos. Cuando fueron incubados en condiciones óptimas y en medios de cultivo con 0.25 μg/mL de As (concentración promedio de aguas naturalmente contaminadas), encontramos que la concentración de este metaloide en el medio de cultivo disminuyó por debajo del límite de detección de la técnica TXRF (MDL 0.1 μg/mL de As), sugiriendo capacidad remediadora. Conclusión Concluimos que la técnica Fluorescencia de Rayos X ha sido una herramienta valiosa para estudiar la bioacumulación y remediación de As y metales pesados, por lo que se utilizará durante la producción de biomasa bacteriana y la subsiguiente purificación de los biopolímeros de su cubierta, para el desarrollo de resinas naturales de purificación de agua.

Referencias:

[1] Yadav MK, Saidulu D, Gupta AK, Ghosal PS, Mukherjee A. *Status and management of arsenic pollution in groundwater: A comprehensive appraisal of recent global scenario, human health impacts, sustainable field-scale treatment technologies*, J. Environ. Chem. Eng. **9**, 105203 (2021). DOI

[2] Lamela PA, Navoni JA, Pérez RD, *et al.*, *Analysis of occurrence, bioaccumulation and molecular targets of arsenic and other selected volcanic elements in Argentinean Patagonia and Antarctic ecosystems*, Sci Total Environ. **681**, 379 (2019). DOI

[3] Lamela PA, Pérez RD, Pérez CA, Bongiovanni GA. *Use of synchrotron radiation X-ray fluorescence and X-ray absorption spectroscopy to investigate bioaccumulation, molecular target, and biotransformation of volcanic elements*, X-Ray Spectrom. **47**, 305 (2018). DOI

Detectores de Rayos cósmicos por efecto Cherenkov y sus potencialidades

• Adriana Maria Gulisano,[1,2,3] for the LAGO Collaboration[4]

[1] *Instituto Antártico Argentino, Dirección Nacional del Antártico, Argentina.*
[2] *Instituto de Astronomía y Física del Espacio, CONICET- UBA, Buenos Aires, Argentina*
[3] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*
[4] *The Latin American Giant Observatory Collaboration (see list of members and institutions at http://lagoproject.net/collab.html).*

La Colaboración LAGO (LATIN AMERICAN GIANT OBSERVATORY) es un Observatorio que utiliza detectores de rayos cósmicos por efecto Cherenkov en agua, que se expande desde México hasta su nodo más austral en la península Antártica, abarcando diferentes latitudes y rigideces de corte. Se abordarán los objetivos científicos del Observatorio y también se detallarán diversos usos tecnológicos que están siendo evaluados para los detectores de partículas inicialmente diseñados para el estudio de la cascada secundaria de rayos cósmicos, el estudio y monitoreo de condiciones de meteorología del espacio entre otros. Se detallarán las potencialidades del uso de detectores de rayos cósmicos para aplicaciones geofísicas, algunos de los miembros de la Colaboración han realizado estudios preliminares y diseños para el monitoreo de volcanes por ejemplo, en otras partes del mundo se utiliza la tomografía de muones para prospección no destructiva de objetos en contenedores y para el estudio no destructivo de grandes estructuras bajo ciertas condiciones y otras aplicaciones tecnológicas. El objetivo principal es la investigación básica, pero el conocimiento generado permitiría en el futuro el derrame tecnológico para aplicaciones geofísicas o comerciales.

La Constelación SAOCOM 1 y sus Aportes a las Necesidades Sociales, Económicas, Productivas y Ambientales

• Laura Frulla[1]

Comisión Nacional de Actividades Espaciales (CONAE)

La tarea de la Comisión Nacional de Actividades Espaciales (CONAE) consiste en proponer e implementar un Plan Espacial Nacional, siendo uno de sus objetivos generar información para los sectores económicos, sociales y productivos de nuestro país. En este marco, se desarrolló la Misión SAOCOM 1, constelación de dos satélites gemelos (SAOCOM 1A y 1B). SAOCOM 1A puesto en órbita el 7 de octubre de 2018 (ya operativo) y SAOCOM 1B el 30 de agosto de 2020 (operativo próximamente). Ambos satélites son los primeros de la serie de satélites en microondas que la CONAE diseña y junto con más de 80 empresas y aportes del sistema científico-tecnológico, desarrolla y pone en órbita. Además, la CONAE lleva adelante su operación junto con la empresa VENG, su brazo comercial. Se trata por lo tanto, de satélites nacionales con una novedosa y compleja tecnología para contribuir a la observación de la Tierra, constituyendo uno de los proyectos tecnológicos más desafiantes llevado a cabo en el país. Los satélites SAOCOM llevan a bordo un instrumento de Radar de Apertura Sintética (SAR) de banda L polarimétrico. Sus características principales son la independencia con la hora del día (captaciones diurnas y nocturnas) y con las condiciones meteorológicas (captaciones en condiciones de nubosidad y lluvia), la capacidad de penetración por debajo de la superficie terrestre, y .por su condición de radar polarimétrico, la cualidad de identificar las formas y las estructuras geométricas que los pulsos encuentran a su alcance en la superficie terrestre. Los objetivos generales de esta Misión son satisfacer lo planteado en el Plan Espacial Nacional e integrarse al SIASGE (Sistema Ítalo-Argentino de Satélites para Gestión de Emergencias). Así se conforma un novedoso Sistema compuesto por 2 satélites SAOCOM 1 (SAR banda L polarimétricos) y 4 satélites llamados COSMO-SkyMed (banda X). Estos últimos fueron desarrollados por la Agencia Espacial Italiana (ASI) y su información está disponible para Argentina por la cooperación entre la CONAE y la ASI. Con el SIASGE es posible obtener imágenes del mismo lugar adquiridas en algunos casos con sólo 10 minutos de diferencia entre un SAOCOM y un COSMO-SkyMed, con diferentes resoluciones espaciales (1 a 100 m), diferentes tamaños de coberturas (franjas de 10 a 350 km) y una revisita de 12 horas a 8 días. Adicionalmente a esto también presentan diferentes posibilidades de penetración a través de las superficies que son alcanzadas por los pulsos de microondas debido a las diferencias entre la banda X (longitud de onda corta sin posibilidad de penetración) y la banda L (longitud de onda larga con posibilidad de penetración). Esto se traduce en obtener información complementaria mediante la cual es posible identificar simultáneamente ciertos aspectos de la superficie observada (COMOS-SkyMed) y otros que se hallan por debajo de la misma (SAOCOM). El objetivo principal de la Misión SAOCOM es dar apoyo a la agricultura y se hace mediante la generación de mapas de humedad del suelo. El conocimiento de la humedad del suelo es de fundamental importancia para una correcta gestión del agua, que no sólo aplica a los aspectos agropecuarios en zonas agrícolas por excelencia, sino también en zonas áridas y semiáridas en las que los problemas de la escasez de agua hacen este tipo de información aún más necesaria. Por otra parte, la versatilidad del instrumento SAR le permite a su vez identificar variaciones de alturas y desplazamientos del terreno. Ambas posibilidades, estimación de humedad de suelo y de desplazamientos del terreno, son muy exigentes para la construcción del instrumento por las características radiométricas y la determinación de los niveles de ruido que se requieren. Sin embargo, esto logran hacer posible que las mediciones obtenidas con los instrumentos SAR a bordo de los satélites SAOCOM 1 puedan contribuir con la generación de un sinnúmero de aplicaciones y productos derivados de gran utilidad para la sociedad y en particular de gran beneficio para el sector del downstream. Dichos productos satisfacen a casi todas las áreas del medioambiente y del sistema productivo argentino, tales como monitoreo forestal y de humedales, glaciares y niveles de agua en ríos y mares, explotación petrolera y minera, apoyo a la construcción, al ordenamiento territorial

y al análisis de expansión urbana, entre otros.

Cruzando disciplinas para convertir un desarrollo en un prototipo

• Hernán E. Grecco[1]

[1] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Instituto de Física de Buenos Aires, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas*

En nuestro grupo estudiamos cómo la organización espacial de la materia viva emerge de la acción conjunta de moléculas nanométricas. Como ocurre en muchas áreas del conocimiento, no siempre existen métodos capaces de cuantificar los procesos relevantes y así poder resolver las preguntas de interés. Por este motivo desarrollamos técnicas experimentales y de análisis de datos que nos permitan cuantificar y luego modelar observables como interacción y movilidad de proteínas, así como los patrones que se forman a través de células y tejidos. Recientemente desarrollamos un microscopio óptico de fluorescencia con componentes reflectivos que nos permite observar durante horas organismos enteros con resolución subcelular. Si bien el dispositivo cumplía su función, entendimos rápidamente que para lograr salir de nuestro laboratorio necesitábamos otros saberes. Así nació el proyecto Cruza: una interacción entre personas con formaciones diferentes de las Facultades de Ciencias Exactas y Naturales, y Arquitectura, Diseño y Urbanismo de la Universidad de Buenos Aires que nos permitió transformar nuestro desarrollo en un prototipo.

Y-TEC, un puente entre el sector científico y el productivo

• Juan Carlos Soria,[1] • Gustavo Moreno,[1] • Jorge Javier Aira[1]

[1] *Y-TEC*

En esta charla, presentaremos el modelo de trabajo de Y-TEC, la empresa de investigación y desarrollo de YPF y el CONICET. La compañía funciona en el centro de investigación aplicada más moderno del país y uno de los más importantes de Latinoamérica, con 47 laboratorios, 12 plantas pilotos y más de 1000 equipos. Con un modelo innovador, es un puente entre el sector científico y el sector productivo. Orienta su investigación en líneas estratégicas enfocadas en las problemáticas y oportunidades clave de la industria de la energía y prioriza proyectos de alto impacto. En la segunda parte, hablaremos de un reciente desarrollo: Y-CAM, nuestra tecnología de cámaras térmicas inteligentes. Y-CAM es un sistema de adquisición y análisis de imágenes mediante cámaras térmicas, que permite la detección de eventos anómalos de una manera simple y con bajo costo. El sistema, integrado en Y-TEC, explota una nueva familia de sensores termográficos utilizados actualmente en la fabricación de teléfonos. Cuenta con aplicaciones en diversos entornos de energía: desde la detección temprana de mermas de producción y derrames en yacimientos, hasta la seguridad industrial y patrimonial. Sus múltiples opciones de conectividad le permiten integrarse fácilmente a plataformas IoT para visualizar los eventos y generar notificaciones.

Gestión de la Propiedad Intelectual en Instituciones Públicas de Ciencia y Tecnología

• María Lorena Talbot Wright[1]

[1] *Directora Oficina de Propiedad Intelectual Universidad Nacional de Córdoba.*

Las instituciones de Ciencia y Técnica (CyT) se consideran marco como principales centros de producción de conocimiento científico y tecnológico. De esta manera, las universidades se convierten en fábricas de conocimientos e invenciones, pero no necesariamente estos conocimientos son transferidos de manera eficiente a la sociedad. Es así que el principal interrogante que se presenta, es cómo transferir de manera eficiente los desarrollos que se crean en la institución. Dario Codner, en su trabajo "La transferencia tecnológica ciega: desafíos para la apropiación del conocimiento desde la universidad" conceptualiza a la fuga de conocimientos como transferencia tecnológica ciega. El conocimiento científico que se genera en las instituciones educativas, financiado principalmente por diversos fondos públicos, generalmente se liberan al dominio público a través de los papers. Es la lógica de la ciencia académica, y la migración de conocimientos hacia el estado del arte es un fenómeno casi imperceptible. Como ejemplo, se utilizará el caso de la gestión de la propiedad intelectual, en la Universidad Nacional de Córdoba como estrategia en la transferencia tecnológica. Identificación de intangibles y cómo darle valor agregado para una eficiente apropiación del sistema productivo.

Emprender: una opción para transferir conocimiento e impactar positivamente en la sociedad

• Nicolás Tognialli[1]

[1] *Centro de innovación Tecnológica, empresarial y social (CITES)*

En la charla se compartirán varias experiencias relacionadas con la transferencia tecnológica a través del desarrollo de startups científicas. Se expondrá el proceso de desarrollo de un startup propio, NanoDetección, y las lecciones aprendidas en el camino. Esta experiencia disparó un segundo emprendimiento, CITES, un venture builder ideado para ayudar a una nueva generación de emprendedores de base científica brindando soporte empresarial e inversión en dinero. En esta parte de la charla se abordarán diferentes casos de estudio para ejemplificar las diferentes aristas que se deben abordar a la hora de emprender el desafío de crear una compañía basada en aplicaciones científico-tecnológicas.

Herramienta para la simulación de problemas termo-ópticos tridimensionales y paramétricos

• Luis Emiliano Jan,[1] Facundo Zaldivar Escola,[1,2,3] Nélida Mingolo[1]

[1] *Laboratorio de Haces Dirigidos - Departamento de física - Universidad de Buenos Aires, Facultad de Ingeniería*
[2] *CONICET*
[3] *Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas*

Se presenta la implementación de un sistema numérico capaz de resolver problemas térmicos y ópticos en una gran variedad de condiciones de simulación en forma paramétrica.

Las funcionalidades pueden dividirse en dos simuladores interrelacionados. Uno resuelve la ecuación del calor para el problema térmico, mientras que el otro las integrales de Fresnel para el problema óptico. Ambos se encuentran descritos íntegramente en tres dimensiones.

El simulador óptico presenta una variedad de fuentes, superficies y elementos ópticos paramétricos que permite propagar, mediante algoritmos optimizados para la reducción de tiempos de cómputo, el campo eléctrico escalar resolviendo las integrales de Rayleigh-Sommerfield o Fresnel dependiendo de las condiciones ópticas.

El simulador térmico presenta una gran cantidad de operadores y acciones paramétricas con las cuales se define la simulación. La misma resuelve un cuerpo octaédrico con propiedades térmicas y ópticas heterogéneas en cada nodo. La discretización puede definirse en cada dimensión en forma independiente. Los diferentes forzantes, tanto de Dirichlet como de Von Newman, pueden agregarse dependiendo del propósito de la simulación y pueden ser dependientes del tiempo y/o la posición.

Al iniciar la simulación el motor térmico toma todos los forzantes, las configuraciones del material, etc. y resuelve los perfiles térmicos, los cuales pueden ser enlazados con el simulador óptico para estudiar efectos fototérmicos. El cálculo se encuentra optimizado para la ejecución en múltiples procesadores o GPU dependiendo de las configuraciones establecidas. También se disponen optimizaciones específicas para el almacenamiento de datos en RAM, conservando únicamente la información que será utilizada.

El simulador termo-óptico fue desarrollado empleando la tecnología .NET la cual presenta buena performance en el cálculo de operaciones. Se han incluido interfaces gráficas embebidas para la visualización de los diferentes fenómenos simulados, y la capacidad de exportar los resultados para ser incorporados en otros lenguajes tales como Matlab y Python.

Este desarrollo ha sido ampliamente validado a partir de la contrastación de sus resultados con modelos analiticos de interés entre los que se destacan, el problema transitorio de una barra finita con condiciones de Dirichlet en sus extremos, la conservación de energía térmica en materiales heterogéneos y la recreación numérica de la técnica de caracterización de superficies por sensado de propiedades térmicas locales, denominada Microscopía Fototérmica Confocal (MFC)[1] la cual fue desarrollada por el grupo. Esta técnica se basa en el calentamiento local de una muestra mediante un haz láser gaussiano circular modulado en potencia, denominado haz de bombeo. Un segundo haz con diferente longitud de onda incide colinealmente al haz de bombeo en la superficie, y es reflejado por ésta. El frente de onda reflejado presenta información de la curvatura del material debida a la dilatación termo-elástica sub-nanométrica de la misma. El haz reflejado se propaga por los diferentes elementos ópticos hasta reinyectarse parcialmente en una fibra óptica. Todo el proceso se logró simular obteniendo resultados consistentes con mediciones de laboratorio realizadas con la técnica de MFC y con los modelos teóricos propuestos en [1], que describen la respuesta de la señal adquirida por dicha técnica como función de las propiedades térmicas del material.

Los casos presentados son sólo una muestra de la funcionalidad del simulador desarrollado, pero no son un límite de sus capacidades. La versatilidad para la elección de las propiedades térmicas y ópticas de cada nodo, las condiciones de borde, forzantes y la posibilidad de incluir una gran variedad de componentes ópticos, lo hacen una herramienta poderosa para la simulación de un sinnúmero de problemas termo-ópticos tanto de interés académico como tecnológico e industrial.

Referencias:

[1] N. Mingolo, O.E. Martínez, *Focus Shift photothermal method for thermal diffusivity mapping*, J. Appl. Phys. **111**, 123526 (2012).

Síntesis y caracterización de catalizadores para la reducción de emisiones de CO2 mediante su transformación a gas natural sintético

• David Córdova,[1] Fabiana Gennari,[1,2,3] Gabriel De Piano[2]

[1] *Instituto Balseiro - Universidad Nacional de Cuyo*
[2] *Centro Atómico Bariloche - CONICET, Comisión Nacional de Energía Atómica*
[3] *Departamento Fisicoquímica de Materiales*

Uno de los grandes desafíos que enfrenta la comunidad científica en la actualidad es reducir la cantidad de emisiones de CO2 para frenar el calentamiento global. Parte de estos esfuerzos se enfocan en la implementación de energías renovables que se pueden almacenar mediante la producción de hidrógeno; el cual, aparte de ser un combustible libre de emisiones, sirve para reutilizar el dióxido de carbono transformándolo en gas metano. Esto se puede lograr empleando un catalizador que promueva la reacción de metanación. En investigaciones anteriores se ha sintetizado un catalizador de níquel sobre un soporte de ceria con una conversión de CO2 de hasta 70%. El objetivo de esta investigación es sintetizar, caracterizar y medir la conversión de un catalizador conformado por un soporte de Al203 y un 10% de CeO2 para bajar los costos de la síntesis del mismo. Se sintetizaron catalizadores de dos maneras, mediante impregnación simultánea e impregnación sucesiva ceria y el níquel sobre Al203. Se determinó el área específica de 149 m^2/g y 186 m^2/g para los catalizadores sintetizados mediante impregnaciones sucesivas y simultáneas, correspondientemente. Se determinó que ambos catalizadores tienen una estructura mesoporosa. Se estudió la estructura de las muestras con difracción de rayos X, y se midió la conversión de CO2 utilizando cromatografía obteniendo como resultado una conversión de hasta 60% a 400 °C para el catalizador sintetizado mediante impregnaciones simultáneas. Se analizará los factores que promueven la conversión en el catalizador que dio una más alta conversión respecto del otro.

De Exactas a la empresa: desarrollos en pandemia

• Federico Trupp,[1,2] • Silvia Goyanes[1,3]

[1] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*
[2] *Laboratorio de Polímeros Materiales Compuestos, IFIBA-DF-FCEN-UBA.*
[3] *CONICET*

La pandemia generada por el SARS-COV 2 dejó un panorama difícil para la ciencia experimental, lleno de restricciones y dificultades. Sin embargo, también generó un abanico de necesidades que debían ser respondidas por la investigación científica y tecnológica. El LPMC-DF-FCEN-UBA tomó esa situación como una oportunidad para aplicar los conocimientos y experiencia previos y ponerlos a servicio de la sociedad, como correspondía en tal situación. Para eso, requería no sólo generar un conocimiento y producto en escala laboratorio, sino lograr escalarlo y transferirlo al sector industrial, capaz de abastecer a la población. El trabajo aquí presentado consiste en un grupo de desarrollos tecnológicos realizados total o parcialmente por integrantes del LPMC, y transferidos a diferentes empresas, abordando algunas problemáticas de la actual pandemia. En primer lugar, se logró desarrollar y transferir un desarrollo con Licencia de *Know How* a la PyME Kovi SRL (Atom Protect) en colaboración con la UNSAM y la Dra Llois (FCEN-UBA). Este desarrollo consistió en la incorporación de activos bactericidas, fungicidas y antivirales (nanopartículas (NPs) de plata y cobre y cloruro de benzalconio) a telas de algodón-poliéster, para la fabricación de barbijos de uso social. Los activos tienen la función de prevenir infecciones bacterianas y la proliferación de hongos generados por la humedad propia de la respiración, así como inactivar virus de la superficie de los barbijos. A pesar del éxito de mercado, nuestro grupo detectó en el diseño del primer producto algunas cosas a mejorar (ajuste del barbijo a la cara, rechazo de ciertos grupos al empleo de NPs, eficiencia de filtrado). En este marco, desarrollamos un producto para impregnar telas de algodón-poliéster, reemplazando las NPs por un activo antiviral natural, biocompatible, biodegradable e incluso comestible. El producto fue licenciado a la empresa textil Indaltex SA, que llevó a la comercialización de una serie de nuevos artículos que utilizan esta tecnología como bactericida, viricida y fungicida con la marca Antivir. Se desarrolló un barbijo con diseño ergonómico, ajuste nasal, con un cierre elastomérico para un óptimo ajuste a la cara. Además, se le adicionaron telas no tejidas de PP logrando una alta eficiencia de filtrado. Se desarrolló también un barbijo para hipoacúsicos en donde la física se aplica a la elección del plástico transparente. La licencia de la tecnología incluye el uso de los activos en diferentes aplicaciones, desde guardapolvos hasta sábanas, proyectándose más allá de la actual pandemia. Finalmente, el grupo se abocó a la aplicación de una técnica trabajada hace años en el laboratorio: electrospinning (electroestirado), mediante la cual es posible crear mallados de nanofibras poliméricas. Surgió así la idea de fabricar mascarillas N95, en escasez al comienzo de la pandemia. El electrospinning tiene la ventaja de que permite incorporar activos directamente dentro de la fibra, garantizando homogeneidad en su distribución y evitando su desprendimiento. El grupo trabajó nuevamente junto con la UNSAM y la Dra Llois en un proyecto otorgado por el Fonarsec para incluir los activos utilizados en el desarrollo de los Atom Protect. Posteriormente, el grupo comenzó un nuevo desarrollo utilizando los activos de la formulación licenciada a Indaltex. Controlando las magnitudes físicas de la solución polimérica y los parámetros físicos del proceso de electroestirado, se lograron obtener telas no-tejidas con fibras nanométricas. Los filtros obtenidos tienen varias ventajas respecto de las mascarillas N95 tradicionales ya que mejoran la respirabilidad manteniendo la eficiencia de filtrado, tiene un costo de producción menor y son más livianos. En este contexto nació la interacción con la empresa Eslingar-Delta Plus Argentina, la primera empresa en fabricar mascarillas N95 en el país en plena pandemia. La negociación abierta no solo tiene como objetivo la comercialización del producto, sino la constitución de una Empresa de Base Tecnológica que instale la producción industrial de electrospinning, inexistente en Latinoamérica hasta el momento. Se busca así fortalecer aún más el lazo entre las investigaciones científicas y el sector industrial, y continuar la labor de desarrollar productos innovadores en respuesta

a problemáticas sociales.

¿Sirven los termómetros de infrarrojos para medir la temperatura corporal?

• Marcelo N. Jiménez Rebagliati[1]

[1] *Departamento de Termodinámica – Metrología Física. INSTITUTO NACIONAL DE TECNOLOGÍA INDUSTRIAL (INTI)*

Con el advenimiento de las pandemias ocurridas durante las últimas dos décadas (SARS 2002-2004, Gripe Aviaria 2004-2006, Gripe A 2009-2010, COVID-2019), se introdujeron en el mercado, en forma masiva, instrumentos para medir la temperatura corporal de humanos. Nos referimos a termómetros de radiación y a cámaras que operan en el espectro de infrarrojos. Durante esta exposición centraremos nuestra atención, a modo introductorio, en el principio de funcionamiento de los termómetros de radiación. También abordaremos el tema de la medición de la temperatura corporal y de la problemática que surge de aplicar una técnica basada en el uso de este tipo de instrumentos. Evaluaremos la incertidumbre de medición para los casos de una medición con la persona situada: a la intemperie y en un ambiente de temperatura controlada. Finalmente mostraremos resultados bibliográficos relativos a la eficacia del uso de estos termómetros, para la detección de personas con COVID-19.

Introduction to Autonomous Vehicles

• Daniel Watzenig[1]

[1] *Graz University of Technology*

• A basic introduction to the sense-plan-act challenges of autonomous vehicles
• Introduction to the most common state-of-the-art sensors used in autonomous driving (radar, camera, lidar, GPS, odometry, vehicle-2-x) in terms of benefits and disadvantages along with mathematical models of these sensors
Autonomous driving is seen as one of the pivotal technologies that considerably will shape our society and will influence future transportation modes and quality of life, altering the face of mobility as we experience it by today. Many benefits are expected ranging from reduced accidents, optimized traffic, improved comfort, social inclusion, lower emissions, and better road utilization due to efficient integration of private and public transport. Autonomous driving is a highly complex sensing and control problem. State-of-the-art vehicles include many different compositions of sensors including radar, cameras, and lidar. Each sensor provides specific information about the environment at varying levels and has an inherent uncertainty and accuracy measure. Sensors are the key to the perception of the outside world in an autonomous driving system and whose cooperation performance directly determines the safety of such vehicles. The ability of one isolated sensor to provide accurate reliable data of its environment is extremely limited as the environment is usually not very well defined. Beyond the sensors needed for perception, the control system needs some basic measure of its position in space and its surrounding reality. Real-time capable sensor processing techniques used to integrate this information have to manage the propagation of their inaccuracies, fuse information to reduce the uncertainties and, ultimately, offer levels of confidence in the produced representations that can be then used for safe navigation decisions and actions.

Desafíos Metrológicos de la Transformación Digital

• Héctor Laiz[1,2,3,4]

[1] *Gerente de Metrología y Calidad del Instituto Nacional de Tecnología Industrial (INTI).*
[2] *Director de la Maestría en Calidad Industrial del Instituto de la Calidad Industrial (UNSAM).*
[3] *Miembro del Comité Internacional de Pesas y Medidas (CIPM).*
[4] *Ex Presidente del Sistema Interamericano de Metrología (SIM).*

La presentación se enfocará en presentar los desafíos y oportunidades que para la metrología representa la transformación digital (TD) en curso. Estamos en medio de una acelerada TD que está desafiando las prácticas de trabajo tradicionales de la metrología y los paradigmas de trazabilidad y reproducibilidad. Si queremos garantizar la coherencia y la confianza en las mediciones en este nuevo mundo es necesario tanto llevar la metrología al mundo digital como "digitalizar" la metrología. La metrología puede aprovechar estos avances tecnológicos para mejorar la productividad y la calidad de las mediciones. Al mismo tiempo, la comunidad metrológica también puede contribuir al despliegue de la TD utilizando la metodología de la ciencia de las mediciones para garantizar la confiabilidad de las mediciones realizadas en la sociedad. Existe la necesidad de una infraestructura estandarizada y aceptada internacionalmente para la procedencia de los datos, certificados de calibración digital y ontologías aceptadas para el intercambio de información y para que los datos de mediciones sean legibles por las máquinas. Estos criterios deben estar integrados en las normas internacionales y establecidos a través de la colaboración interdisciplinaria e intersectorial.

Sistema Internacional de Unidades (SI) accionable por máquina

El Certificado de Calibración Digital (DCC), es de suma importancia para que el intercambio de información cuantitativa (por ejemplo, resultados de mediciones, capacidades de medición, datos de comparaciones) sea accesible en forma digital, lo que permite que las máquinas no solo lean los datos, sino que lo hagan sin ambigüedades. La implementación del Sistema Internacional de Unidades (SI) en un formato digital adecuado y aceptado internacionalmente (SI legible por máquinas) es necesaria como base fundamental para la transformación digital de los servicios metrológicos existentes y su aplicación en un contexto de Industria 4.0, AI y ML.

Big Data e inteligencia artificial

Existen desafíos para asegurar la confianza en la información derivada de las mediciones en contexto complejos. Los ejemplos incluyen imágenes cuantitativas en el diagnóstico médico, la combinación de grandes conjuntos de datos de sensores conectados a Internet con calidades muy diferentes o cómo mantener el control de calidad metrológico en la fabricación avanzada cuando toda la cadena de suministro está habilitada digitalmente. El uso de los principios de datos FAIR (siglas en inglés de localizable, accesible, interoperable y reutilizable) permitirá a todas las partes interesadas en un ecosistema digital maximizar el valor extraído de los datos de las investigaciones científicas mediante la provisión de un conjunto de pautas para gestionar, conservar y administrar los datos. Por otro lado, establecer los métodos de medición para evaluar y probar el sistema de inteligencia artificial para determinar su confiabilidad, incluidas las cuestiones de explicabilidad, equidad, transparencia, solidez, seguridad y sesgo, es fundamental para garantizar un despliegue seguro de dicha tecnología.

Procesos Industriales

El control eficiente de procesos de producción cada vez más complejos y, al mismo tiempo, flexibles, típicos del marco de la Industria 4.0, requiere un conocimiento detallado y en tiempo real de los parámetros del proceso. La multitud de sensores y dispositivos de medición necesarios deben proporcionar datos de medición fiables y precisos con metadatos legibles por máquina. En particular, se necesita una comunicación confiable entre los sensores y las máquinas basada en protocolos estandarizados e inequívocos. Las calibraciones requeridas para estos procesos cada vez más automatizados y digitalizados, requieren nuevas capacidades y estrategias de calibración. Se necesita también el modelado de sensores y gemelos digitales de dispositivos de medición, la verificación de algoritmos de medición

digital, la calibración dinámica de sensores, el tratamiento holístico de redes de sensores y la evaluación de la incertidumbre de sistemas complejos. La integración de métodos de fabricación convencionales y aditivos en la infraestructura de fabricación en red también requiere enfoques metrológicos innovadores.

Capacidades emprendedoras para la formación de Científicos-Innovadores en América Latina en etapas tempranas de la investigación básica

• David Hurtado[1]

[1] *Founder CEO de LicenciArte*

La transferencia de tecnología o la creación de spin-off de las universidades y centros de investigación son mecanismos importantes para crear y transformar el valor de las invenciones científicas en oportunidades comerciales. Estas oportunidades se convierten en nuevos productos o servicios, impulsados por el sector empresarial, al mercado o a la sociedad en general. Los científicos en entornos académicos están en una posición única para dar forma a tales oportunidades incluso desde el momento en que se plantean las hipótesis de investigación y se realizan los descubrimientos científicos. Esto es mucho antes de que se comienza la promoción para la transferencia de tecnología o se funda una spin-off derivada de la universidad. En la literatura, se encuentran estudios referentes a las capacidades innovadoras de los científicos en fases de creación de spin-off, pero muy pocos estudios se relacionan con la generación de dichas capacidades en etapas tempranas, entendiéndose las etapas donde se realizan los descubrimientos científicos (en la escala Technology Readiness Level, TRL, clasificados de 1 a 3). Muy pocos estudios se refieren a las capacidades científico-innovadoras de América Latina. En la presente conferencia se expondrá un estado del arte preliminar que determine cuales son las capacidades de los científicos innovadores en mercados desarrollados. Posteriormente, se presentarán los resultados de una indagación preliminar a los científicos innovadores de América Latina consultado cuales deberían ser dichas capacidades y si se consideran que pudieran llegar a ser científicos-innovadores. En resumen, se presentan cuatro capacidades provenientes del mundo empresarial que se han ajustado a la formación de spin-off universitarias exitosas basadas en la ciencia. Estas

• Encontrar uno o varios engranajes entre la tecnología-mercado.

• Proteger la invención de forma temprana y con un alcance de protección amplio (reivindicando todas las posibles aplicaciones tecnológicas).

• Atraer mentores, asesores y expertos interdisciplinarios al equipo científico.

• Establecer los momentos estratégicos para patentar, publicar en revistas científicas de élite, promocionar para atraer mentores/inversionistas/fundadores y formar el spin-off/publicar oferta de licencias.

En la encuesta "Descubriendo el Científico-Innovador de LatAm" respondieron 114 personas de todo el continente. El 76% considera que sí y el 23% considera que aún no lo sabe. Tan solo el 2% asegura que no se considera un científico-innovador.

El contexto latinoamericano postpandemico es prometedor para la innovación y el emprendimiento. En el último trimestre, el continente ha visto como sus startups han sido compradas o han salido a bolsa, se han generado 3 nuevos unicornios (empresas valoradas por mas de USD 1.000M de dólares) y la inversión ha sido exponencial en 2021. Por otro lado, la sensación de perder nuestros familiares o la propia vida a causa del COVID, sumado a la adaptación tecnológica introducida a la fuerza para poder realizar nuestras actividades diarias, ha generado un nuevo arquetipo de latinoamericano que yo llamo el "Tecnolatino". Todas estas condiciones sumado a un entendimiento e investigaciones adicionales sobre las capacidades del científico innovador de LatAm en etapas tempranas podría impulsar exponencialmente nuestra región para desarrollar producto y servicios basados en conocimiento.

Modelo bi-material para Microscopía Fototérmica Confocal

• Facundo Zaldivar Escola[1,2]

[1] *Laboratorio de Haces Dirigidos - Departamento de física - Universidad de Buenos Aires, Facultad de Ingeniería*
[2] *Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Tecnológicas (CONICET), Godoy Cruz 229, Buenos Aires, Argentina*

La Microscopia Fototérmica Confocal (MFC) [1] ha sido desarrollada por el grupo y aprovecha las ventajas de toda técnica fototérmica, las cuales permiten obtener propiedades térmicas a nivel local de todo tipo de materiales sin contacto y de manera no destructiva, pero agrega tecnología basada en sistemas de fibra óptica logrando una robustez y sensibilidad únicas. Se utiliza un haz de sensado para la medición de la respuesta de la muestra debido a efectos locales inducidos por el calentamiento con un láser de bombeo modulado (curvatura superficial y cambios en la reflectividad debido al aumento de temperatura). Ambos láseres emergen de una misma fibra óptica y la señal detectada corresponde a la reinyección, en la misma fibra, de la porción del haz de sensado reflejada sobre la superficie. Principalmente, se busca determinar la difusividad térmica local del material, dado que permite exponer un alto contraste entre las fases del mismo y, mediante una microscopia de esta propiedad, se logra obtener información de su homogeneidad y la presencia de aglomerados y poros [2-4]. Mediciones como función de la temperatura permiten el estudio de transformaciones de fase [5]. Adicionalmente, en metales se ha mostrado la correlación entre la inversa de esta propiedad y la dureza [6], mientras que en óxidos mixtos sinterizados utilizados como combustibles nucleares se correlaciona con la concentración del óxido minoritario [3]. Dado que se utilizan potencias bajas ($\approx 1\mu$W), no se observa degradación o cambios en las muestras. Esto ha permitido el estudio de compuestos poliméricos, lográndose la identificación de la distribución de agregados e incluso la medición del porcentaje de cristalinidad de la matriz polimérica [4]. Dependiendo del material, se deposita una capa delgada ($\approx$20nm) de Pt sobre la superficie, para garantizar la absorción del haz de bombeo y la reflexión del haz de sensado. La determinación de la difusividad térmica se realiza a partir de la estimación de la frecuencia crítica para la cual la distancia que difunde el calor en un período de modulación se iguala al tamaño del haz de bombeo. En los estudios previos mencionados, esta estimación se logró a partir del ajuste de la señal fototérmica por los modelos monomaterial descriptos en Ref. [1] de fotorreflectancia (cambio de la señal debido a la variación del índice de refracción local) y efecto de curvatura (cambio de la reinyección debido a la curvatura superficial inducida). Estos modelos son únicamente validos cuando se cumple que el espesor de la capa superficial es mucho menor al tamaño del haz de bombeo y si no se produce difusión lateral en el interior de la capa, de modo que puede asumirse que la energía absorbida del haz de bombeo, es convertida en calor sobre la capa y transferida totalmente a la muestra. Sin embargo, recientes mejorías de resolución espacial del sistema a partir de la reducción del tamaño de los haces, y su extensión al campo de los compuestos poliméricos han ido desplazando la validez de dichos modelos, obligando replanteos que consideren la existencia de la capa superficial con diferentes propiedades ópticas y térmicas. En este trabajo se describen los nuevos modelos fototérmicos desarrollados a partir de la resolución de la ecuación del calor, para la obtención de la distribución de temperatura y curvatura superficial de un sólido compuesto por un sustrato seminfinito, con una capa superficial de ancho variable, el cual es calentado por un haz gaussiano de bombeo normal a la superficie. Se comparan los modelos monomotareial y bi-material para diversos materiales y distintas relaciones de tamaño entre el haz de bombeo y el espesor de la capa. Los resultados permiten identificar los casos donde es crucial el uso de los nuevos modelos para la interpretación de las mediciones con MFC.

Referencias:

[1] N. Mingolo, O.E. Martínez. J. Appl. Phys. **111**, 123526 (2012).
[2] F. Zaldivar Escola; D. Kunik; O. E. Martínez; R. Kempf; N. Mingolo. Procedia Materials Science **8**,

665 (2015).
[3] F. Zaldivar Escola , R. Kempf, N.Mingolo, O. E. Martínez. Int. J. Thermophys. **37**, 1 (2016).
[4] F. Zaldivar Escola, Polymer Testing. **84**, 106378 (2020).
[5] F. Zaldivar Escola, O. E. Martínez, N. Mingolo. Revista Materia **23**, no. 2 (2018).
[6] U. Crossa Archiopoli, N. Mingolo, O. E. Martínez. Surf. Coat. Technol. **205**, 3087 (2011).

La cuántica y la metrología para no expertos

• Mariano Real[1]

[1] *Física y Metrología - Instituto Nacional de Tecnología Industrial*

Esta charla estará orientada a un público no especialista en física. En ella se dará una introducción a la metrología eléctrica fundamental, donde la cuántica tiene un papel preponderante, y contaremos cómo se interrelaciona con todas las mediciones que se hacen en Argentina y por qué es importante que así sea. También discutiremos algunos periplos que hubo a lo largo de la historia para llegar a donde estamos, como el descubrimiento del efecto Hall cuántico a las 2 de la mañana o el experimento de Avogadro y balanza de Kibble, dos de los experimentos más complejos que jamás se hayan hecho, y que permitieron cambiar la definición del kilogramo en el año 2019. Año en cual pasamos a definir el sistema internacional de unidades únicamente con constantes de la naturaleza y dejamos finalmente el último artefacto de lado.

Experiencias en realización de proyectos de alto impacto en la Educación Técnica, análisis de sus fuentes, sus desarrollos y resultados

• Diego Hugo Barrera[1,2,3,4]

[1] *IPET No51 "Nicolás Avellaneda".*
[2] *IPEA No 209 "Domingo Faustino Sarmiento".*
[3] *Instituto Superior Bernardo Houssay.*
[4] *ProA Marcos Juárez.*

Después de la sanción de la Ley 26.058 de Educación Técnico Profesional (ETP), recién en el año 2015 egresó la primer camada de Técnicos de dicha modalidad (después de casi dos décadas sin este tipo de egresados), en ese momento ninguna escuela tenía todavía la infraestructura ni los recursos necesarios para este nuevo plan de estudios, a pesar de dicha dificultad se decidió comenzar a combinar los recursos de distintas escuelas técnicas disponibles en la ciudad, llegando a sumar la potencialidad de tres (hoy ya cuatro) Instituciones relacionadas con la nueva Educación Técnica. Así surgió la posibilidad de crear proyectos que tengan impacto y utilidad en el medio o industria local, empezando por la necesidad y luego planteando las soluciones posibles desde el punto de vista interdisciplinario de las especialidades e instituciones involucradas. Así fue como el mismo año que se colacionó la primera camada de técnicos, se logró que un proyecto recibiera todos los premios y reconocimientos posibles para este tipo de iniciativa, llegando a representar incluso a nuestro país en el extranjero. Desde el primer proyecto (sin duda de mayor impacto) hasta el último realizado en plena pandemia, han tenido reconocimientos que van desde las cuatro instancias de Feria de Ciencia (regional, provincial, nacional e internacional), concursos como INNOVAR (ganadores o seleccionados para su catálogo) o "Técnicamente de INET" pasando por casi todos los poderes del Estado (Municipal, Concejo Deliberante, Gobernación, Legislatura Provincial, Cámara de Diputados y Cámara de senadores de la Nación Argentina) pasando por apoyo o reconocimientos de instituciones como IEEE, NASA, gobiernos europeos (como Alemania), y recientemente la Comisión Europea y la ONU. Si bien las fuentes de innovación de estos proyectos (más de once desde el primero), tiene un origen de alto desarrollo previo, en muchos casos provistos por experiencias del profesor a cargo (ya sea por empresas desarrolladas o patentes propias) la ayuda brindada proporciona herramientas de vanguardia y de última tecnología a los estudiantes lo permite focalizar las energías en la aplicación de esas fuentes en los desafíos planteados en los pocos meses de desarrollo que brinda el ciclo escolar (sumado al desarrollo habitual de las cátedras que tienen su propia dinámica fuera del proyecto). Claramente año tras año esta acumulación de experiencias va acelerando los desarrollos, ya que utilizan las fuentes de los anteriores proyectos (subiéndose la nueva generación a los "hombros" de los egresados), ya que toda la información de estos está absolutamente documentada, y es accesible para los alumnos que hayan participado (o quieran participar), ya sea para realizar un emprendimiento propio, o para su desarrollo en la carrera de ingeniería que escoja (proyecto final, por ejemplo). Esta propuesta ha motivado a los alumnos que pueden ir a la Universidad a elegir (en más del 95% de los casos) carreras de Ingeniería, Matemática o Física, a los que se quedaron en la región, a conseguir trabajo inmediatamente tanto por la notoriedad pública de los proyecto que participaron como por la natural demanda insatisfecha después de tantos años sin técnicos en la región, también (en menor medida) ha permitido comenzar un emprendimiento con la tecnología adquirida o haciendo de alguno de los proyectos un producto comercial.

CONICET: Socio para la industria

• Sergio Romano[1]

[1] *Vinculación Tecnológica CONICET*

Los desarrollos y tecnologías del CONICET traspasan los límites del laboratorio y llegan a las empresas y entidades productivas para mejorar los productos y servicios. Cómo lo hacemos? Con qué herramientas contamos? Por qué es importante la ciencia y la tecnología en la industria? Ejemplos de vinculación y transferencia. Casos de EBTs. Desafíos afrontados en pandemia.

Estudio de la respuesta magnetoeléctrica en sensores Hall planar sobre sustratos flexibles

• Agostina Lo Giudice,[1] Pablo Granell,[2] Laura Steren[1]

[1] *Laboratorio de Nanoestructuras Magnéticas y dispositivos, INN-CAC, CNEA, Buenos Aires, Argentina.*
[2] *Instituto Nacional de Tecnología Industrial (INTI), Centro de Micro y Nanoelectrónica del Bicentenario (CMNB), Buenos Aires, Argentina.*

Los sensores de efecto Hall Planar han estado ganando prominencia en el campo de los sensores magnéticos por su alta sensibilidad, su fácil fabricación, y su bajo ruido [1]. En particular, a bajos campos éstos sensores exhiben un comportamiento lineal, lo cual combinado con su alta sensibilidad, los ha convertido en excelentes candidatos para aplicaciones de biosensado para nanopartículas magnéticas, y campos magnéticos endógenos del cuerpo humano [2,3,4]. En este trabajo se presenta el análisis de las propiedades magnetoeléctricas de sensores Hall elípticos depositados sobre sustratos flexibles de Ta/NiFe/Ta, y de Pt/NiFe/Ta. Para ambos tipos de sensores, se caracterizó su respuesta eléctrica frente a campos magnéticos de +/- Hsat, poniendo especial énfasis en la región de respuesta lineal, a bajos campos. Las medidas magnéticas fueron realizadas aplicando campos magnéticos paralelos y perpendiculares al eje principal del sensor. Se compararon las sensibilidades obtenidas en la región lineal de cada sensor, y además, se midió el nivel de ruido en las respuestas del sensor.

Referencias:

[1] T. Q. Hung, S. Oh, S. Anandakumar, J. -R. Jeong, D. -Y. Kim and C. G. Kim, IEEE Trans. Mag. **45**, 4518 (2009).
[2] M. Kim et al., IEEE Mag. Let. **11**, 1, (2020).
[3] L. Ejsing, M. F. Hansen, and A. K. Menon, Appl. Phys. Lett. **84**, 4729 (2004).
[4] Granell, P.N., Wang, G., Cañon Bermudez, G.S. *et al.*, npj Flex. Electron. **3**, 3 (2019).

Vínculos con la industria de los reactores nucleares multipropósito y nuevas tendencias en su diseño

• Felipe Albornoz[1]

[1] *INVAP - Subgerente de Tecnología - Gerencia de Negocios Nucleares*

La presentación abordará las aplicaciones industriales de los reactores multipropósito diseñados y construidos por INVAP, y a partir de allí tratará de explicar el rol de INVAP como empresa de proyectos tecnológicos tanto dentro del país como en el ámbito externo. Luego se hará un repaso de las actividades de innovación que son de aplicación al área de reactores multipropósito que se están desarrollando en el resto del mundo y que merecen la atención de INVAP.

Cambio climático: historia, actualidad y perspectivas

• Fernando Arizmendi[1]

[1] *Instituto Uruguayo de Meteorología (INUMET), Montevideo, Uruguay.*

El impacto de la emisión de gases de efecto invernadero sobre la temperatura media global se conoce desde hace mucho tiempo. Aún viendo consecuencias muy graves como inundaciones, sequías e incendios sin precedentes, en algunos ámbitos sigue siendo un tema de debate. En esta charla haremos un repaso histórico del avance científico en el entendimiento del problema. Además, presentaremos el estado actual y las perspectivas a futuro haciendo referencia al último informe del Panel Intergubernamental de Cambio Climático (IPCC) que fue emitido recientemente y que hace foco sobre las bases físicas del cambio climático.

Sintetizador de señales de bajo costo con fines magnetobiológicos

• Luis Emanuel Días,[1] Leonardo Makinistian[2]

[1] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Físicas, Matemáticas y Naturales - Universidad Nacional de San Luis*
[2] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales, Universidad Nacional de San Luis, e Instituto de Física Aplicada, INFAP (UNSL-CONICET)*

Recientemente, al conjunto de señales tradicionalmente exploradas en magnetobiología (senoidales, triangulares, cuadradas, entre otras) se sumó una nueva clase: las denominadas señales "moduladas en frecuencia con bloqueo de fase" (señales "PLFM", por sus siglas en inglés). Éstas, fueron derivadas teóricamente pero aún no se han puesto a prueba en el laboratorio. Interesados en realizar experimentos de exposición a campos magnéticos (CM) modulados según las señales PLFM, abordamos la tarea de desarrollar un dispositivo que las genere. Para ello utilizamos una placa Arduino DUE que posee un conversor digital-analógico para generarlas, su seteo es por medio de comunicación Bluetooth con un módulo HC-06 a través de una aplicación (*"app"*) desarrollada $ad\ hoc$ utilizando la suite gratuita MIT App Inventor instalada en un teléfono celular. La señal generada es amplificada y posee un voltaje máximo de 8 V con una presición de 4 mV y una corriente máxima de 1 A. Para aportarle versatilidad, el sistema también permite sintetizar señales convencionales, y configurar e importar exposiciones complicadas incluyendo intermitencias y ciclajes. En este trabajo presentamos el diseño completo del sistema, arquitectura de la app, pruebas de respuesta en frecuencia y los primeros experimentos de exposición a levaduras.

Proyecto de Extensión de Vida de la Central Nuclear Embalse

• Aníbal Barrera,[1] • Gustavo Diaz,[1] • Pablo Luna,[1] • Oscar Monsech[1]

[1] *Nucleoeléctrica Argentina S.A.*

CNE es una central tipo CANDU, diseñada por la empresa AECL, cuyo Turbogenerador y sistemas auxiliares fueron diseñados y montados por la empresa Italimpianti (con Ansaldo como proveedor principal). CNE tiene un reactor de tubos de presión, en los que se alojan los combustibles que pueden ser reemplazados durante la operación. Estaba diseñada para producir 648 MWe durante un ciclo de operación de 25 años a 100% de plena potencia, o 30 años calendario.

Esta limitación en la duración de su ciclo de operación está basada en el alargamiento de los canales combustibles debido a la acción simultánea de la temperatura y los esfuerzos soportados (fenómeno de creep). Este alargamiento es compensado hasta un límite determinado, por encima del cual se deben reemplazar los tubos de presión.

Extender el período de operación de centrales nucleares es un proceso ya realizado en otras plantas en el mundo. Para el caso de las CANDU solo se ejecutó previamente en tres centrales donde, con el apoyo de AECL, el personal de CNE adquirió experiencia en las fases del proyecto.

Con el propósito de extender el período de operación de CNE, en el año 2010 se creó la Gerencia del Proyecto Extensión de Vida (PEV) con el objetivo de llevar adelante esta tarea que estuvo compuesta por tres grandes fases:

Fase I - Análisis de envejecimiento y seguridad El análisis de envejecimiento se realizó mediante evaluaciones de estado y evaluaciones de vida para definir las condiciones en que se encontraban los Sistemas, Estructuras y Componentes, realizar la prognosis de vida de los mismos e identificar recomendaciones y/o modificaciones que eran necesarias llevar a cabo para alcanzar el período original de diseño y poder extender el período de operación 30 años más.

El análisis de seguridad se implementó para verificar los cambios de diseño o intervenciones necesarias para mantener o mejorar la seguridad de la Central durante el nuevo ciclo de producción.

Debido a la oportunidad única para implementarlo, también fue necesario desarrollar un estudio de "Aumento de Potencia", que permitiría un incremento de la salida eléctrica y consecuentemente un retorno económico mayor para la empresa. Esto requirió modificaciones y optimizaciones adicionales.

Estos análisis dieron lugar a aproximadamente 1000 recomendaciones, que debieron ser evaluadas técnica y económicamente para definir cada uno de los cambios de diseño e intervenciones necesarias para lograr extender el período de operación de CNE.

Fase II - Ingeniería de detalle y compras

Todos los cambios de diseño e intervenciones aprobadas para ejecución debieron ser desarrolladas. Es decir, la ejecución de la ingeniería de detalle, especificaciones y planes de trabajo e iniciar el pedido, compra, fabricación, seguimiento de fabricación, pruebas, transporte, recepción, almacenamiento de todos los componentes necesarios para la fase siguiente.

La tarea de licenciamiento en esta etapa fue una continuación de la iniciada en la Fase anterior, e incluyó el desarrollo del nuevo Informe Final de Seguridad de CNE que requirió nuevos análisis determinísticos y probabilísticos.

Fase III - Montaje y puesta en marcha

Esta fase consistió en una parada programada de 18 meses, iniciada el 31 de diciembre de 2015, para ejecutar todos los reemplazos y modificaciones surgidas de los estudios previos. La principal tarea que determinó la duración de dicha parada fue el cambio de los Canales de Combustible del Reactor. También fueron de gran relevancia el reemplazo de los Generadores de Vapor, las modificaciones a los Sistemas de Seguridad, y el Repotenciado y Reacondicionamiento del Ciclo Térmico.

Concluido el montaje de todos los equipos, fueron necesarias las pruebas de aceptación y garantía, la puesta en marcha de la planta, el licenciamiento oficial y la transferencia de operación de arranque a

operación normal.

NUEVO CICLO DE OPERACIÓN:

El Inicio de la operación a largo plazo en modo económico y seguro, demandó del esfuerzo conjunto de todos los sectores de la Industria Nuclear Argentina. La experiencia adquirida durante este proyecto generó personal capacitado para afrontar un nuevo ciclo de operación, con el objetivo de mejorar la buena performance de los primeros 30 años de operación de CNE.

Modelado CFD para el estudio de separación isotópica orientado al enriquecimiento de Uranio

• José Héctor González[1]

[1] *CIC - CONICET Instituto Balseiro Centro Atómico Bariloche.*

Dentro del proyecto Lasie de la Comisión Nacional de Energía Atómica, se desarrollan tecnologías de separación isotópica, en particular basadas en procesos aerodinámicos asistidos por excitación láser. Estas técnicas poseen interés particular por proyectar una mayor eficiencia en el proceso separativo, medido según factores de mérito objetivos. Parte del trabajo se encuentra focalizado en el estudio de los aspectos aerodinámicos del proceso, en diferentes configuraciones, y su relación con los fenómenos difusivos involucrados. Por otro lado, se observan las condiciones que favorecen a la formación de polímeros en la mezcla gaseosa susceptible a ser reprimida selectivamente mediante excitación láser. Actualmente se está estudiando el proceso de difusión de especies en mezclas de gases en dos geometrías de interés, buscando cuantificar fenómenos separativos. Se modela el problema fluidodinámico (flujo compresible en régimen supersónico) con CFD, utilizando el software ANSYS Fluent, disponible dentro del proyecto. Para cuantificar la separación se utiliza un código difusivo desarrollado dentro del proyecto. Los cálculos se han comparado con resultados experimentales obtenidos dentro del proyecto Lasie. Se determinó que la difusión se encuentra gobernada por una combinación de mecanismos fluido-dinámicos y térmicos. Dos resultados importantes del estudio son que el perfil de concentración se encuentra lejos de las condiciones de desarrollo difusivo, y que las temperaturas en la zona central del jet son suficientemente bajas como para favorecer el fenómeno de clusterización. Esta posible aglomeración de moléculas se contrastó con mediciones experimentales, y se desarrolló un modelo efectivo que da cuenta de una posible explicación del comportamiento, también relacionada con una longitud de desarrollo para el mismo.

Experiencias en la creación de emprendimientos de base científica y tecnológica

• Andrés Colombo[1,2]

[1] *Coordinador de la Incubadora de Empresas de la Universidad Nacional de Córdoba.*
[2] *Socio Fundador NovoSens.*

El consenso general entre los economistas es que el desarrollo de un país o región requiere de un ingrediente fundamental: la generación y proliferación de empresas de base científica y tecnológica (EBTs). Es por esto que actualmente, y con independencia del grado de desarrollo de una región, los responsables de políticas públicas abordan unánimemente distintas iniciativas de fomento de la innovación, el emprendedorismo tecnológico, la transferencia de conocimiento científico y el fortalecimiento de la economía del conocimiento. Si bien existen tendencias y herramientas particulares, lo cierto es que cada región o país adopta sus propios enfoques. En Argentina, la generación de EBTs ha sido un proceso bastante cambiante, con épocas más o menos fértiles para la generación de nuevas empresas. En este contexto, los emprendimientos basados en know-how científico y tecnológico resultan de particular importancia. Si bien el espectro que engloba los distintos tipos de emprendimientos es bastante amplio, el nicho de EBTs basadas en ciencia y tecnología es bastante estrecho, amén de que se trata del yacimiento de emprendimientos de mayor potencial por su capacidad para generar exportaciones, empleos de calidad y dinamizar la economía. Las universidades argentinas, y en particular las nacionales -que concentran la mayor parte de la ciencia que se desarrolla en nuestro país-, son actores claves del ecosistema de innovación. Históricamente, han estado rezagadas en cuanto a la incorporación de políticas e iniciativas de promoción del emprendedorismo y la transferencia de tecnología hacia el sector socio productivo. No obstante, en las últimas dos décadas, esta tendencia se ha ido revirtiendo. La Universidad Nacional de Córdoba (UNC) no ha sido ajena a este proceso. Es así que se ha montado en la tendencia de convertirse en una universidad emprendedora, en línea con muchas otras universidades nacionales y de todo el mundo. Una de las iniciativas más importantes de la UNC fue la creación de su Parque Científico y Tecnológico, que dio origen a una Incubadora de Empresas (IE). Se trata de una experiencia sin igual, que rompe la lógica del discurso universitario en el sentido de apuntar a generar un espacio de trabajo multidisciplinario. que permita el testeo y la validación de ideas de negocios por parte de la comunidad universitaria. Desde el 2012, la IE ha trabajado con distintos enfoques. Su misión es clara: se busca fomentar la creación de empresas tecnológicas basadas en el conocimiento generado en la Universidad. Los mecanismos para desplegar esta misión han sido variados. En primer lugar, se ha pasado de un enfoque de emprendimiento como pequeña empresa a otro en el que se considera a una EBT en gestación como una organización riesgosa que debe validar hipótesis. Este cambio de paradigma no es menor: rompe con años de inercia hacia la utilización de métodos y modelos de gestión de empresas en organizaciones inestables como lo son las startups tecnológicas. Por otro lado, uno de los desafíos más importantes del espacio fue la definición de estándares y enfoques para la selección y apoyo de proyectos tecnológicos. Es así que se han puesto en juego mecanismos para evaluar aspectos como el grado de innovación, la fortaleza de equipos de emprendedores, el estadio de desarrollo de una idea, etc. Si bien estos procesos son claves en la gestión de la IE, han ido cambiando y adaptándose al contexto local y las particularidades de los yacimientos de emprendedores de la UNC. En el primer caso, los ciclos económicos y las consecuentes políticas de apoyo y fomento de la innovación tienen un impacto tremendo en la perspectiva de desarrollo de un emprendimiento basado en ciencia y tecnología. Esta situación se hace más evidente cuando el sector se ve sumido en una cuarta ola de innovación, caracterizada por EBTs deep-tech, que mezclan diversas tecnologías para atacar problemas globales, generando productos complejos de alto impacto. Esta tendencia se ha acentuado con la pandemia actual: el desafío es cómo la universidad se adapta a este contexto, máxime cuando se considera la necesidad de que este tipo de emprendimientos se vinculen con varios actores y se nutran de distintas organizaciones y partes interesadas, en contraste con la visión ya obsoleta del emprendedor de garaje que

puede, con menos recursos, generar una empresa tecnológica exitosa. En relación con los yacimientos de emprendedores, los desafíos no son menores. ¿Qué tipo de emprendedores queremos para nuestras EBTs basadas en deep-tech? ¿Qué mecanismos implementados para generar la inserción de científicos argentinos en empresas tecnológicas? Más aún: ¿qué rol juega esta inserción cuando se trata de científicos en emprendimientos en formación, con las particularidades que esto implica, sobre todo por la falta de fondos y la superposición de tareas y obligaciones? Estas preguntas han generado intensos debates en el ecosistema de innovación y puertas adentro de la Universidad. Si bien no es posible acertar respuestas categóricas, sí es interesante desplegar líneas de pensamiento y poner en juego experiencias de otros sectores y otras universidades alrededor del mundo. El debate continúa abierto: la experiencia de la UNC es interesante en cuanto a la generación de mecanismos para la incorporación de científicos en los emprendimientos que apoya y la casuística generada a partir de estas experiencias.

Recursos + Humanos

• Horacio Llovet[1]

[1] *Nawaiam, empresa de tecnología y gamificación para RRHH.*

En un contexto en donde la vida se dio vuelta, donde los diferentes roles se superponen, donde la vulnerabilidad es protagonista y cada día es un nuevo desafío, desde Nawaiam, buscamos aportar una mirada renovada y optimista al rescate del ser humano.
Proponemos un nuevo rumbo, basado en oportunidades, en el bienestar, en la colaboración, la resiliencia, la empatía, en la diversidad. Dejemos de hablar de Recursos Humanos, hablemos de Personas. Apostemos, acompañemos y cuidemos al fundamental y más valioso capital de cualquier organización, humanicemos a las empresas.
Invitamos a un espacio en el cual compartiremos reflexiones, datos y nuestro aporte para encarar juntos una nueva forma de liderar, un replanteo, que entendemos como clave, para el área de Recursos Humanos de las diferentes organizaciones. Con este fin, abordaremos el gran aporte que nos traen la tecnología y la gamificación; la importancia de una mentalidad innovadora, ágil y una actitud flexible para poner todas las herramientas y energías al servicio del ser humano.

Conocimiento y Desarrollo "Un desafio que se promueve en el Instituto Balseiro"

Mariano Cantero,[1] Graciela Bertolino,[1] • Daniel Dominguez,[1] • Maria Luz Martiarena[1]

[1] *Instituto Balseiro (CNEA-UNCuyo-CONICET)*

El Instituto Balseiro (IB) es una institución pública y gratuita con una serie de características que lo hacen único. Fue creado en 1955 y se concretó su formalización en el convenio firmado entre la Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA) y la Universidad Nacional de Cuyo (UNCUYO). El Instituto Balseiro es una unidad académica integrada al Centro Atómico Bariloche (CAB) que cuenta con laboratorios de punta en investigación y desarrollo a los que los estudiantes del IB tienen acceso para realizar prácticas. Trabaja en forma permanente con la misión de aportar de un modo sustancial al crecimiento del país en Ciencias y Tecnología a través de la formación de científicos y tecnólogos tanto en el área nuclear con fines pacíficos como en la no-nuclear. Estos logros se alcanzan a partir del fomento y concreción de actividades académicas de alto nivel.

Es destacable el hecho de que todos los estudiantes del IB reciben becas completas de la CNEA, lo que les permite una dedicación plena al estudio. Éste, entre otros aspectos distintivos, permite que los alumnos de las carreras de grado y posgrado del IB accedan a una formación de avanzada tanto en los aspectos teóricos como en la práctica de laboratorio y la innovación tecnológica.

Los estudiantes del IB reciben educación personalizada dada la relación, en cantidad y calidad, docente-alumno. A la vez, estos docentes son investigadores y tecnólogos en actividad que se vinculan en forma continua tanto con centros científicos y tecnológicos como con empresas de tecnología en el país y el mundo. De este modo, la experiencia adquirida se transmite a los estudiantes quienes se forman en un ámbito estimulante de investigación científica y desarrollo tecnológico de vanguardia; enfrentan el desafío de crecer profesionalmente en una actitud crítica y con capacidad para resolver problemas novedosos y de alta complejidad. Por otro lado y siguiendo la premisa fundacional del Dr. José Balseiro, los estudiantes realizan prácticas en los laboratorios de primer nivel del CAB como parte indisoluble de los currículos respectivos. La formación se completa con diversas materias optativas y cursos especiales.

En el Instituto Balseiro se dictan carreras de grado en Física, Ingeniería Nuclear, Ingeniería Mecánica e Ingeniería en Telecomunicaciones. También, se brindan siete carreras de posgrado: la Carrera de Especialización en Aplicaciones Tecnológicas de la Energía Nuclear (CEATEN), las maestrías en Física, Física Médica e Ingeniería y los doctorados en Física, Ingeniería Nuclear y Ciencias de la Ingeniería.

Via la secretaría de extensión y cultura científica en el IB realiza una amplia variedad de actividades gratuitas de comunicación pública de la ciencia y la tecnología, para todas las edades y también específicas para el ámbito educativo formal. Entre estas actividades se destacan el apoyo a estudiantes universitarios en la web, becas para pasantías dirigidas a alumnos de colegios secundarios, capacitación a docentes de todos los niveles, colaboraciones en Ferias de CyT escolares, la muestra CAB-IB de experimentos para todo el público, charlas de especialistas en escuelas, eventos culturales, programas de radio, divulgación de temas CyT en medios masivos, entre otros. El objetivo es alentar la democratización de la ciencia en diálogo con la sociedad.

El Instituto Balseiro, a través de la Secretaría de Vinculación e Innovación, genera y apoya interacciones entre sus docentes, alumnos y exalumnos- con el sector socio-productivo. En este ámbito se desarrollan distintas actividades de escuelas de posgrado, talleres, y Becas de Verano, Escuelas de Especialización, Talleres, Congresos, Conferencias, Coloquios y Workshops. En este ámbito se organiza también el IB50K, el concurso del IB para promover empresas de base tecnológica desde los jóvenes

Se busca potenciar la inserción Instituto en el tejido socio productivo, promoviendo el desarrollo sustentable del país basado en el Conocimiento".

Estudio de selectividad en frecuencia en el régimen transitorio en sistemas simples de señalización

• Alejandra C. Ventura[1,2]

[1] *Instituto de Fisiología Biología Molecular y Neurociencias, CONICET-UBA*
[2] *Departamento de Fisica, FCEyN, UBA*

Numerosos trabajos estudian cómo una red de señalización celular procesa estímulos que dependen del tiempo: información que recibe del entorno extracelular (Martinez-Corral Garcia-Ojalvo, 2017), o bien información que llega a una parte de la red luego de que otras redes procesaron ya estímulos extracelulares (Sumit, Neubig, Takayama, Linderman, 2015). En estos trabajos se intenta entender cómo una red de señalización implementa funciones celulares específicas en base a la información recibida. En particular, muchos investigadores, incluidos nosotros mismos, han enfocado sus estudios en el procesamiento de estímulos o señales periódicas. Algunas de las muchas preguntas que surgen son: ¿cómo una dada red (con un cierto número de componentes y una conectividad específica) responde en función de la frecuencia de estimulación?, ¿hay una frecuencia o rango de frecuencias que optimizan la respuesta que se espera de esa red de señalización? En este proyecto, en cambio, definimos la noción de preferencia transitoria en frecuencia. Hemos mostrado que ciertas redes simples de señalización presentan preferencia en frecuencia transitoria, es decir que, durante un intervalo previo a la llegada a estado estacionario responden óptimamente en un dado rango de frecuencias. En este proyecto estudiamos las causas de esta preferencia transitoria y clasificamos redes de señalización simples según su posibilidad de dar una respuesta transitoria óptima para ciertas frecuencias de estimulación.

El rol de las rotaciones por defectos de forma en el coeficiente de restitución

• Fabricio Éric Fernández,[1] Marcelo Fabián Piva,[1] Román Gustavo Martino,[2] Maria Alejandra Aguirre[3]

[1] *Grupo de Medios Porosos, Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires*
[2] *Instituto de Estudios Avanzados en Ingeniería y Tecnología*
[3] *Grupo de Medios Porosos, Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires, CONICET.*

Los sistemas granulares son altamente disipativos y la forma en que transfieren energía y llegan al equilibrio resulta esencial en poder comprender problemas de estabilidad de sistemas granulares, como el desencadenamiento de avalanchas (pérdida de estabilidad) y su detención (equilibrio estable o metaestable). Usualmente, esta disipación se caracteriza mediante el coeficiente de restitución que depende de diversos factores entre los que se incluyen las propiedades de los materiales, la geometría del cuerpo y la velocidad de impacto. Este coeficiente se define como el cociente entre la componente de la velocidad que es normal a la superficie de contacto justo antes de chocar (Vn) y la misma componente, pero inmediatamente después de la colisión (Vn). Se espera que el coeficiente de restitución sea menor o igual a 1, donde la igualdad se da para choques perfectamente elásticos.
A fin de comprender la transferencia de energía en la interacción de un grano con su entorno mientras este llega al equilibrio se realiza el estudio del comportamiento de partículas planas de N lados (N = 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 15 e infinito, i.e. disco) rebotando sobre una superficie plana hasta que alcanza su estado de reposo.
En este trabajo se muestran los principales resultados obtenidos con respecto a la dependencia del coeficiente de restitución con la velocidad de impacto Vn y con la cantidad de lados de las partículas. Para velocidades bajas se observaron valores del coeficiente de restitución que se apartan significativamente del valor medio y hasta alcanzan valores mayores a 1. Se presentará una interpretación de estos resultados en términos de la transferencia de energía cinética de traslación a energía cinética de rotación.

Biomecánica celular: integrando las fuerzas de tracción con la dinámica de proteínas adhesivas en entornos mecánicos controlados

• Lorena Sigaut,[1] Micaela Bianchi,[2] Catalina von Bilderling,[3] Lía I. Pietrasanta[1,2]

[1] *Departamento de Física e IFIBA-CONICET, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires*
[2] *Centro de Microscopías Avanzadas, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires*
[3] *Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas, CONICET y Universidad Nacional de La Plata*

Las células son capaces de ejercer fuerzas de tracción a través de estructuras multiprotéicas transientes denominadas adhesiones focales, que unen físicamente a la célula con el sustrato. Aún no se entiende por completo cómo se generan y transmiten estas fuerzas de tracción celular, que son cruciales para mantener la forma celular y la migración, y juegan un rol importante en muchos procesos biológicos, como por ejemplo la cicatrización, la inflamación o la metástasis del cáncer. En este trabajo se presentarán estrategias orientadas a detectar y cuantificar fuerzas de tracción, a modificar de forma controlada el entorno mecánico y a entender cómo las células detectan y responden a fuerzas mecánicas externas [1,2]. A nivel molecular, estamos interesados en la dinámica de dos proteínas de adhesión focal, zixina y vinculina, que exhiben propiedades mecano-sensoras. Nuestra estrategia se basa en combinar e integrar distintas microscopías y espectroscopías de alta resolución en células vivas, junto con la micromanipulación del sustrato. De esta forma podemos analizar la biomecánica de la célula-sustrato, detectar las fuerzas generadas en/por la célula, monitorear la dinámica de las proteínas adhesivas y evaluar la respuesta global de la célula a diferentes entornos mecánicos.

Referencias:

[1] Sigaut L, von Bilderling C, Bianchi M, Burdisso JE, Gastaldi L, and Pietrasanta LI., Sci. Rep. **8**, 9788 (2018).
[2] Sigaut L, Bianchi M, von Bilderling C, and Pietrasanta LI., PLoS One, **16**, e0251411 (2021).

Caracterización in vivo de la migración colectiva en embriones de pez cebra

• Gastón L. Miño,[1,2,3] María F. Sampedro,[2,3] Carolina D. Galetto,[2] Valeria Sigot[2,3]

[1] *Grupo de Investigación en Microfluídica de la Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Entre Ríos (FIUNER)*
[2] *Laboratorio de Microscopía Aplicada a Estudios Moleculares y Celulares (LAMAE), Facultad de Ingeniería Universidad Nacional de Entre Ríos (FIUNER)*
[3] *Instituto de Investigación y Desarrollo en Bioingeniería y Bioinformática (IBB - CONICET - UNER), 3100 Oro Verde, Argentina*

La migración colectiva dentro de un organismo es un fenómeno presente en la formación de órganos durante el desarrollo, en ciertas invasiones tumorales o en procesos de curación de heridas. Un rasgo característico en este movimiento es la polaridad del conjunto celular que migra, mediante la cual las células "líderes" en el borde del tejido guían a las "seguidoras" mientras se dan paso entre el tejido epitelial circundante.
En este trabajo, empleamos la velocimetría de imágenes de partículas (del inglés Particle Image Velocimetry - PIV) como una herramienta para cuantificar la dinámica *in vivo* durante la migración colectiva del primordio de la línea lateral posterior (pLLP) en embriones de pez cebra.
La cadherina-GFP epitelial fue el marcador fluorescente que permitió registrar secuencias temporales de imágenes para el análisis de PIV. A nivel de tejido, la velocidad global y la direccionalidad del primordio se extrajeron de campos de velocidad promediados espacialmente. Del análisis se pudo observar que los patrones de velocidad fluctuantes evolucionan a nivel de mesoescala, y permitieron distinguir un frente principal pseudo-mesenquimatoso del borde posterior epitelializado. Durante la separación de la mayoría de los protoneuromastos (conjunto celular en forma de roseta ubicado en la parte posterior del grupo celular) se evidenció una desaceleración global en la dirección de migración del primordio.
Los campos de velocidades locales obtenidos por PIV demostraron ser una herramienta sensible en la estimación de la velocidad de migración y la direccionalidad del pLLP en el pez cebra, y permite predecir la separación incipiente de protoneuromasto en escalas de tiempo cortas, pudiendo resultar apropiados para analizar la dinámica de otros modelos de migración colectiva *in vivo*.

Aspectos morfológicos de las mitocondrias en células vivas

• Agustina Belén Fernández Casafuz,[1] María Cecilia De Rossi,[2] Luciana Bruno[1]

[1] *Instituto de Cálculo, FCEN, CONICET-UBA*
[2] *Departamento de Química Biológica, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires*

Las mitocondrias cumplen varias funciones en las células, entre las que se destacan la producción de energía y homeostasis celular. Estas organelas cambian de forma, tamaño y distribución de manera dinámica respondiendo a cambios en la función y estado celular. Los filamentos del citoesqueleto han emergido como los principales agentes en la dinámica mitocondrial participando en la remodelación de sus redes facilitando los procesos de fisión y fusión, transporte y localización. Sin embargo, se han observado transiciones morfológicas de estas organelas que no estarían asociadas a procesos de fisión-fusión y cuya función aún no ha sido del todo dilucidada.
Es por esto que en este trabajo realizamos un estudio morfológico de las mitocondrias en ausencia de eventos de fisión o fusión. Analizamos imágenes de microscopía confocal de células melanoforas de Xenopus laevis en donde marcamos las mitocondrias con una sonda fluorescente. Mediante el análisis de estas imágenes recuperamos las formas de mitocondrias individuales para caracterizar los aspectos morfológicos y dinámicos de éstas. Estimamos la rigidez flexural del conjunto poblacional a través del cálculo de la longitud de persistencia determinando que se trata de organelas muy flexibles. Además implementamos un método de clasificación de las formas mediante el análisis de Fourier de la curvatura, lo que nos permitió estudiar la distribución de formas y transiciones morfológicas de estas organelas. La frecuencia de transiciones entre diferentes morfologías presenta una distribución anómala, con una mayor persistencia de las formas de menor curvatura. Nuestros resultados sugieren que estas dinámicas están asociadas a las fuerzas activas moduladas por las redes del citoesqueleto.

Tensional twist-folding and scrolling of elastic sheets

• Julien Chopin[1]

[1] *Instituto de Fisica, Universidade Federal da Bahia, Ondina, Salvador de Bahia - Bahia, 411-1, Brasil*

Twisting sheets has been used widely by humanity in making catgut bow strings and surgical sutures going back thousands of years and has been more recently proposed as a strategy to make structured yarns from ultra-thin materials. Yet, a formal description of the underlying shape transformations has been neither reported nor even recognised.
Enabled by nondestructive x-ray reconstruction, we show that twisted elastic sheets under tension follow ordered paths to form multilayered self-scrolled yarns through recursive folding and twist localisation.
I will present a tensional twist-folding framework combining elasticity and origami to explain the energetics before self-contact and morphologies observed until the formation of a yarn. Quite surprisingly, our study reveals that origami can be harnessed to understand the transformation of stretchable sheets into self-assembled architectures with a simple twist.

Reactive transport, mixing and filtration

• Pietro de Anna[1]

[1] *Institute of Earth Sciences, University of Lausanne, CH-1015, Lausanne, Switzerland*

Natural soils are host to a high density and diversity of substances, suspensions and microorganisms, and even deep-earth porous rocks provide a habitat for active microbial communities. In these environments, transport by disordered flows is relevant for a broad range of natural and engineered processes, from biochemical cycling to remineralization, bioremediation and filtration. A key property of most porous systems is the underlying heterogeneity that may occur due to non-uniformity in size or shape of the constitutive grains. Such physical heterogeneity controls transport and mixing of solutes driving geochemical reactivity kinetics and colloidal/bacterial deposition and filtration. The complexity that rises from the coupling of these microscopic processes, makes predictions based on rates measured under homogenized, well-mixed, conditions different by orders of magnitudes from field observations.
I present and discuss numerical methods and laboratory experiments (based on micro fluidics and time-lapse video-microscopy) to investigate the microscopic processes (as flow, transport, microbial growth) that take place within the confined space of the heterogeneously distributed pores and, at the same time, we monitor their macroscopic consequences (including deposition profiles, breakthrough curves, reaction kinetics and biomass growth). Based on such pore-scale observations, we build new theoretical models, that we feed with directly measured parameters, to unravel the link between the microscopic and the macroscopic scale.

Ángulo de reposo de pellets de biomasa

• Marcos Madrid,[1,2,3] José M. Fuentes,[1] Eutiquio Gallego,[1] Francisco Ayuga[1]

[1] *EIPIRMA-ETSI Agrónomos, Universidad Politécnica de Madrid*
[2] *Departamento de Ingeniería Mecánica, Facultad Regional La Plata, Universidad Tecnológica Nacional*
[3] *Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos, CONICET-UNLP*

En la actualidad, y gracias al gran avance de la capacidad de cálculo de las computadoras, las simulaciones con Método de los Elementos Discretos (DEM) han cobrado remarcada importancia en el ámbito de los materiales granulares. Para poder extraer información útil de este tipo de simulaciones, es necesario utilizar parámetros propios de las partículas, tales como su densidad, módulo de elasticidad, coeficiente de restitución y ángulo de reposo, entre otros. En particular, este último es de vital importancia ya que nos permite obtener informaciones sobre sus propiedades de almacenamiento, particularmente en silos. Las normas existentes fijan un procedimiento experimental para la determinación del ángulo de talud o reposo de vertido de los agentes de superficie en polvo o granulados, pero estas no prevén el uso de nuevos materiales como los pellets de biomasa, cuyas dimensiones y propiedades no permiten utilizar dichos métodos. En la literatura, varios artículos utilizan indistintamente métodos diversos para realizar esta medida. En el presente trabajo, utilizando un modelo adaptado, similar al previsto por la norma Española UNE 55547-81, mostramos que el ángulo de reposo depende no sólo de la altura elegida para realizar experimento, sino también de la superficie de la base sobre la cual se depositan los granos.

Rheotaxis inducida por quiralidad

• Diego Edgardo Karam,[1] Adolfo J. Banchio[2,3]

[1] *Independiente*
[2] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*
[3] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*

Utilizando simulaciones numéricas del tipo Dinámica de Stokes (SD) se estudia el movimiento de un micronadador propulsado por un flagelo rígido helicoidal y sometido a un flujo de cizalla. Tanto en la naturaleza, como en dispositivos de microfluídica, la presencia de flujos de distinto tipo es muy frecuente, por lo que resulta de gran interés entender la interacción entre la manera en que se propulsa el micronadador y el flujo ambiente. En particular, si de ésta resulta alguna orientación de nado favorecida, i.e. rheotaxis. En este trabajo se oberva una tendencia del nadador a orientarse en la dirección de la vorticidad del flujo, en concordancia con resultados experimentales y teóricos disponibles en la literatura. La flexibilidad del método (SD) nos permite estudiar la dependencia de dicha orientación con la helicidad y forma general del flagelo así como con la velocidad de nado respecto de la velocidad del flujo ambiente.

Deep learning for microscopy, optical trapping, and active matter

• Giovanni Volpe[1]

[1] *Physics Department, Gothenburg University, Gothenburg, Sweden*

After a brief overview of artificial intelligence, machine learning and deep learning, I will present a series of recent works in which we have employed deep learning for applications in photonics and active matter. In particular, I will explain how we employed deep learning to enhance digital video microscopy, to estimate the properties of anomalous diffusion, to characterize microscopic force fields, to improve the calculation of optical forces, and to characterize nanoparticles. Finally, I will provide an outlook for the application of deep learning in photonics and active matter.

Crecimiento y Caracterización de Nanoestructuras de ZnO. Aplicación en Celdas Solares Híbridas

• Nadia Celeste Vega,[1,2] Fernando Salomón,[3] Monica Tirado,[4] Mauricio Cattaneo,[3] Néstor Katz,[3] David Comedi[2]

[1] *Instituto de Física del Noroeste Argentino*
[2] *Laboratorio de Física del Sólido, Instituto de Física del Noroeste Argentino (INFINOA), Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología, Universidad Nacional de Tucumán (UNT), CONICET, Tucumán, Argentina.*
[3] *Instituto de Química del Noroeste Argentino (INQUINOA), Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas - Universidad Nacional de Tucumán*
[4] *Instituto de Física del Noroeste Argentino - Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas - Universidad Nacional de Tucumán*

En este trabajo se presentan los desarrollos realizados por el grupo de investigación NANOPROJECT, en estos últimos años, hacia el control efectivo de la morfología, estructura y propiedades ópticas de nanoestructuras de ZnO, con especial atención a los nanohilos de ZnO (NHs), y sus aplicaciones. Los métodos utilizados, rentables y simples, pueden ser clasificados en dos grandes grupos: por un lado los mecanismos de generación y transporte de vapor de precursores a temperaturas elevadas, así como las reacciones de estos precursores en diferentes sustratos pretratados que producen diferentes mecanismos de crecimiento, se describen en detalle para la técnica de deposición de transporte de vapor. Por otro lado, se encuentran los métodos de síntesis a baja temperatura, donde se delinean tres técnicas: deposición sol-gel, solvotérmica y electroforética, haciendo hincapié en el control efectivo de la morfología, la estructura y las propiedades ópticas. Finalmente, se muestra la aplicación de estas nanoestructuras de ZnO, con modificación en su superficie a partir de la sensibilización de la misma con complejos de Ru, en electrodos para celdas solares DSSC (dye sensityzed solar cell) y en celdas solares orgánicas.

Películas delgadas mesoporosas de YSZ para aplicaciones en celdas de combustible de óxido sólido

• Bernardo Sievers,[1,2] Leticia Granja,[1,2] Andres Zelcer,[3] Ivan Queirolo,[2] Valeria Ferrari,[1,2] Dilson Juan,[1,2] Rodolfo Fuentes,[2] Sebastian Pasannante,[1,2] Joaquin Sacanell[2]

[1] *Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (CNEA-CONICET)*
[2] *Departamento de Física de la Materia Condensada, CAC, CNEA-CONICET*
[3] *Centro de Investigaciones en Bionanociencias*

Cuerpo Con el objeto de potenciar las propiedades de las celdas de combustible de oxido solido (SOFC por sus siglas en ingles), desarrollamos películas delgadas densas y mesoporosas de ZrO2 y 8 porciento de Y2O3 (YSZ), para utilizar como electrolitos. Las películas fueron sintetizadas por sol-gel y se depositaron mediante dip coating sobre substratos de Si y sílica fundida. En el caso de los films mesoporosos, se utilizo Pluronic F127 como agente moldeante para el autoensamblado inducido por evaporación. Las mismas fueron sometidas a distintos tratamientos térmicos para estudiar la evolución estructural que sufrirían en operación. Mediante difracción y reflectometría de rayos X se determinó la estructura cristalina, la morfología, la porosidad accesible y el espesor. Las propiedades electroquímicas de las películas se estudian en una estación de prueba diseñada en el laboratorio para realizar la caracterización eléctrica de películas delgadas y dispositivos desde temperatura ambiente hasta 700 °C. Además, estamos abordando el estudio del YSZ mediante cálculos computacionales DFT con el software Quantum Espresso. Apuntamos a realizar cálculos NEB (nudged elastic band) centrándonos en el transporte de vacancias de oxigeno. En este trabajo analizamos los resultados estructurales y morfológicos obtenidos para las películas de YSZ en función de los tratamientos térmicos realizados, presentamos el diseño de la estación de prueba y encaramos el estudio computacional del YSZ Bulk con el objetivo de poder comparar futuros cálculos con las mediciones en films.

Caracterización electrónica de junturas semiconductoras basadas en nanohilos de InAs

• Joan J. Cáceres,[1] Leandro Tosi[1,2]

[1] *Instituto Balseiro - Universidad Nacional de Cuyo*
[2] *Grupo de Dispositivos y Sensores, CAB-CNEA y CONICET.*

En el presente trabajo presentamos mediciones de caracterización electrónica de junturas semiconductoras basadas en nanohilos de InAs que funcionan como FETs (field-effect transistors). Los nanohilos presentan pocos canales de conducción, y las propiedades varían con la tensión de compuerta aplicada entre un comportamiento más metálico a un comportamiento más aislante. Para las fabricación de las muestras se utilizaron técnicas de litografía que describimos en detalle.

Cátodos nanoestructurados para Celdas de Combustible de Óxido sólido

• Joaquin Sacanell,[1,2] Leticia Granja,[2] Diego Germán Lamas,[3] Bernardo Sievers,[2] Andrés Zelcer[4]

[1] *Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (CNEA-CONICET)*
[2] *Departamento de Física de la Materia Condensada, CAC, CNEA-CONICET*
[3] *Instituto de Tecnologías Emergentes y Ciencias Aplicadas (ITECA), UNSAM-CONICET, Escuela de Ciencia y Tecnología, Laboratorio de Cristalografía Aplicada, San Martín, Provincia de Buenos Aires, Argentina*
[4] *Centro de Investigaciones en Bionanociencias*

Las celdas de combustible de óxido sólido (SOFC), son dispositivos que permiten la conversión de energía química en eléctrica. Su flexibilidad en cuanto al uso de combustibles y su alta eficiencia las posicionan como candidatos muy promisiorios como dispositivos para la generación de energía proveniendo de recursos renovables. Su alta temperatura de operación es una de las mayores desventajas, debido a la degradación de los materiales que ocurre en esas condiciones. Es por esto que en la actualidad se realizan muchos trabajos de investigación orientados a encontrar materiales y estructuras que permitan operar a temperaturas menores, dando lugar a las SOFC de temperatura intermedia. Esto permite adicionalmente la utilización de materiales nanoestructurados, para los cuáles se espera un rendimiento superior en cuanto a las propiedades electroquímicas y la reactividad con los gases (combustible y oxidante). En este trabajo, presentaré una revisión de la investigación en materiales nanoestructurados para uno de los componentes de la SOFC: el cátodo. Me focalizaré en materiales que presentan conductividad mixta iónica y electrónica y en cómo estas propiedades se ven afectadas al utilizar materiales en la nanoescala. Presentaré los aportes de nuestro grupo y colaboradores en este tema, relacionados con el uso de sistemas de nanopartículas, nanotubos y materiales mesoporosos.

Dependencia no monótona de la emisión UV de agregados de nanopartículas de ZnO en función de la potencia de excitación

• Oscar Marin,[1,2] Gustavo Grinblat,[3] Mónica Tirado,[2,4] David Comedi[1,2]

[1] *Nanoproject- LAFISO, INFINOA (CONICET-UNT), Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología, Universidad Nacional de Tucumán*
[2] *Instituto de Física del Noroeste Argentino – INFINOA (CONICET – UNT).*
[3] *LEC, Departamento de Física, FCEN, Universidad de Buenos Aires e IFIBA (CONICET – UBA), Intendente Güiraldes 2160, C1428EGA Buenos Aires, Argentina.*
[4] *Nanoproject- LNPD, INFINOA (CONICET-UNT), Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología, Universidad Nacional de Tucumán*

Las nanopartículas (NPs) de ZnO son materiales multifuncionales con importantes aplicaciones tecnológicas potenciales en diversas áreas, como por ejemplo para la conversión fotovoltaica, remediación ambiental y optoelectrónica. Dentro de sus propiedades se destacan su gap directo y su emisión robusta y estable a temperatura ambiente en el UV [1]. Se han implementado muchas estrategias para optimizar las propiedades optoelectrónicas de las NPs de ZnO, incluyendo la formación de estructuras núcleo/coraza, el dopado y procesos de recocido térmico. Dado que muchas de sus propiedades dependen de los estados superficiales, también se han estudiado métodos de pasivación superficial o control de la interacción entre NPs adyacentes [2,3]. De hecho, una pregunta importante es cómo las propiedades de las NPs de ZnO cambian cuando se depositan desde una suspensión coloidal y son inmovilizadas en un sustrato sólido para formar una película nanogranular. Junto a las cuestiones físicas fundamentales referentes a las interacciones entre NPs adyacentes y NPs/sustrato, estos sistemas nanogranulares tienen interesantes aplicaciones tecnológicas, por ejemplo para desarrollo de sensores, celdas solares y fotocatalizadores. En este trabajo [4], la fotoluminiscencia de agregados de NPs de ZnO fue estudiada en función de la cantidad de NPs en la muestra. Con el incremento de estas, se observó que la banda de emisión UV se ensanchó y corrió a menor valor de energía, mientras que la razón emisión UV/emisión visible (IUV/IVis), decreció. Además, mientras que las muestras con pocas NPs evidenciaron un comportamiento lineal típico en función de la potencia de excitación, las muestras con mayor número de NPs mostraron una dependencia inusual y no monótona, con un máximo de emisión de luz a valores intermedios de potencia de excitación. Junto a esto, para las muestras con mayor número de NPs, la banda de emisión UV se ensanchó a medida que aumentó la potencia de excitación. Estos resultados inusuales pueden ser explicados si se considera un efecto conjunto entre la autoabsorción de fotones, los estados de trampas interfaciales y la dependencia de la altura de la barrera potencial en las interfaces NP/NP con la potencia de excitación. La exposición de las muestras a vapor de etanol durante los experimentos de fotoluminiscencia resultó en una inversión parcial del comportamiento no monótono de la emisión de luz UV. Esto, además de ilustrar la posible aplicación del sistema para el desarrollo de sensores de vapor, nos proporciona una nueva pista acerca del rol específico de los estados de superficie e interfaz NP/NP en los mecanismos detrás de los fenómenos ópticos observados.

Referencias:

[1] O. Marin, V. González, M. Tirado, D. Comedi, Mater. Lett. **251**, 41 (2019).
[2] N.C. Vega, O. Marin, E. Tosi, G. Grinblat, E. Mosquera, M.S. Moreno, M. Tirado, D. Comedi, Nanotechnology. **28**, 275702 (2017).
[3] M. Ghosh, A.K. Raychaudhuri, Appl. Phys. Lett. **93**, 123113 (2008).
[4] O. Marin, G. Grinblat, M. Tirado, D. Comedi, Nano-Structures & Nano-Objects **26** 100734 (2021).

Magnetización de superficie vs magnetización del "core" en nanopartículas esféricas de Fe: Simulaciones acopladas "spin-red"

• Gonzalo dos Santos,[1,2] Robert Meyer,[3] Romina Aparicio,[1,2] Julien Tranchida,[4] Eduardo Bringa,[1,2] Herbert Urbassek[3]

[1] *CONICET*
[2] *Facultad de Ingeniería - Universidad de Mendoza*
[3] *Physics Department and Research Center OPTIMAS, University Kaiserslautern, Erwin-Schrodinger-Straße, D-67663 Kaiserslautern, Germany*
[4] *Computational Multiscale, Center for Computing Research, Sandia National Laboratories*

Simulaciones atomísticas de dinámica spin-red, acoplada con dinámica molecular (Spin-Lattice Dynamics, SLD) se han utilizado previamente para calcular la dependencia de la magnetización de nanopartículas (NP) de Fe con la temperatura y el diámetro de las NP, considerando un momento magnético atómico uniforme en toda la NP [1]. En este trabajo, se presenta un modelo de simulación de SLD que tiene en cuenta la variación del momento magnético en las cercanías de la superficie de las NP. Para esto, se divide a los átomos cercanos a la superficie de aquellos del centro de la NP, en una especie de modelo "Core-Shell" donde los átomos del "core" tienen propiedades similares a las del "bulk". Se simulan NP esféricas de Fe bcc con diámetros de 2-8 nm en un amplio rango de temperaturas 10-900 K. Variaciones en el momento magnético atómico se determinan mediante análisis del volumen atómico y se muestra que, tanto la magnitud del momento magnético como la interacción de intercambio spin-spin tienen que modificarse cerca de la superficie para obtener un buen acuerdo con resultados experimentales. En este sentido, el modelo permite reproducir correctamente el comportamiento del momento magnético promedio como función del diámetro y de la magnetización de la NP vs la temperatura.

Referencias:

[1] G. Dos Santos *et al.*, Phys. Rev. B **102**, 184426 (2020).

Señal indeseada en experimentos de Efecto Kerr Magneto-Óptico con portamuestras paramagnéticos

• Alvaro Muñoz-Noval,[1] Claudio J. Bonin,[2,3] Fernando J. Bonetto,[2,3] Miguel Angel Garcia[4]

[1] *Departamento de Fisica de Materiales, Facultad de Ciencias Fisicas, Universidad Complutense de Madrid*
[2] *Departamento de Física, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral*
[3] *Instituto de Física del Litoral (UNL-CONICET)*
[4] *Instituto de Cerámica y Vidrio (CSIC), Campus de Cantoblanco, 28049, Madrid, España*

Describimos una señal indeseada que puede deformar el ciclo de histéresis en experimentos de Magnetometría Kerr (o MOKE, por sus siglas en inglés). Si el portamuestras está hecho de un material paramagnético, de susceptibilidad magnética no despreciable, inhomogeneidades del campo magnético aplicado pueden inducir fuerzas y torques sobre éste, desviando el haz de luz reflejado, y alterando en consecuencia la intensidad que llega al fotodetector (la cual trae información magnética de la superficie de la muestra en estudio). El efecto causado es par, en el sentido que la deflección del portamuestras es la misma tanto para campos magnéticos aplicados en un sentido como en el sentido opuesto, a medida que se cicla el campo magnético para generar el ciclo de histéresis de la superficie de la muestra en estudio. Este efecto se evitaría al usar portamuestras confeccionados de sustancias diamagnéticas (por ejemplo PTFE-TEFLON) o paramagnéticas de muy baja susceptibilidad magnética. Se presenta una descripción analítica detallada del efecto indeseado, a través del análisis de las fuerzas y torques magnéticos aplicados al portamuestras, y se da una estimación numérica de dicha deflección, la cual es comparable con la rotación Kerr del plano de polarización del haz incidente. Por esto, este efecto indeseado puede distorsionar la señal MOKE. Para el caso que el dispositivo experimental sea afectado por estos efectos indeseados, se presenta un método para remover este efecto de las curvas de histéresis experimentales en ciertas muestras y junto a un análsis de los datos apropiado.

Referencias:

[1] A Muñoz-Noval, CJ Bonin, F Bonetto and MA García, *Experimental artifact in MOKE measurements when using paramagnetic sample holders*, Meas. Sci. Technol. **31**, 127002 (2020).

Efecto magnetocalórico de $La_{0.6}Sr_{0.4}CoO_3$

• Fabiana Morales,[1,2,3] Mariano Quintero,[2,3] Augusto Mejia,[4] Gabriela Leyva,[2,3] Joaquin Sacanell[2,3]

[1] *CONICET - Universidad de Buenos Aires, Instituto de Tecnologías y Ciencias de la Ingeniería "Hilario Fernandez Long" (INTECIN)*
[2] *Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (CNEA-CONICET)*
[3] *Departamento de Física de la Materia Condensada, CAC, CNEA-CONICET*
[4] *Grupo de Películas Delgadas y Nanofotónica, Departamento de Física, Pontificia Universidad Javeriana, Bogotá, Colombia*

El estudio del efecto magnetocalórico (EMC) para su uso como sustituto de los gases tóxicos (clorofluorocarbono (CFC) e hidrofluorcarbono (HFC)) en dispositivos refrigerantes ha despertado gran interés en los últimos 30 años. Este efecto se define cómo un cambio isotérmico en la entropía magnética[1]. En este trabajo se realiza estudio del EMC directo e indirecto y la caracterización estructural, morfológica y magnética de las muestras de polvos nanoestructurados de $La_{0.6}Sr_{0.4}CoO_3$ (LSCO) sintetizados por vía húmeda usando como moldes membranas de policarbonato con poros de 200 y 800nm de diámetro. Se analizaron muestras de LSCO utilizando membranas de 200nm y tratadas a 800°C (C2T1) y 1000°C (C2T2) y utilizando membranas de 800nm tratadas a 800°C (C8T1) y 1000°C (C8T2). Se realizó la caracterización magnética obteniendo magnetizaciones de saturación de hasta 34.4 emu/g, campos coercitivos menores a 100Oe en las curvas de magnetización cercanas a la temperatura de transición. Además, a partir de los resultados obtenidos del EMC calculamos los valores del cambio en la entropía (ΔS) a campos de 10000, 20000 y 30000 Oe, teniendo. que para las muestras C2T2 y C8T2 a temperaturas cercanas a la temperatura ambiente (260K) se obtienen valores de ΔS mayores que para las muestras C2T1 y C8T1. Como perspectivas a futuro, se procederá a sintetizar y caracterizar una serie de muestras con distintas concentraciones de Co y Fe y se analizarán los resultados en conjunto.

Referencias:

[1] H. Biswal, T.R. Senapati, A. Haque, and J.R. Sahu, *Beneficial effect of Mn-substitution on magnetic and magnetocaloric properties of $La_{0.5}Sr_{0.5}CoO_3$ ceramics*, Ceram. Int. **46**, 11828 (2020).

Corrientes de espín singulares en antiferromagnetos cuánticos con banda chata

• Santiago Acevedo,[1] Pierre Pujol,[2] Carlos Lamas[1]

[1] *Instituto de Física de La Plata, CONICET*
[2] *Laboratoire de Physique Theorique, IRSAMC, CNRS and Universit e de Toulouse, UPS, F-3062 Toulouse, France*

Diferentes antiferromagnetos cuánticos frustrados presentan estados fundamentales caracterizados por un arreglo periódico de magnones localizados, cuya relación de dispersión resulta independiente del momento, y como consecuencia la curva de magnetización de estos materiales presenta discontinuidades[1][2]. En este trabajo estudiamos el efecto de interacciones Dzyaloshinskii-Moriya en presencia de una banda chata, tomando por simplicidad la geometría 1D conocída como 'sawtooth chain'[3]. Presentamos resultados numéricos calculados con 'Density Matrix Renormalization Group' (DMRG), y resultados analíticos a partir de integrales de camino en el límite semiclásico $s \to \infty$. El objeto central de estudio es la corriente de espín a temperatura 0, que presenta tres regímenes diferentes (tipo Meissner, tipo Luttinger, o singular) dependiendo de la fase a la que pertenezca el estado fundamental del sistema.

Referencias:

[1] Schulenburg, J. and Honecker, A. and Schnack, J. and Richter, J. and Schmidt, H.-J. *Macroscopic Magnetization Jumps due to Independent Magnons in Frustrated Quantum Spin Lattices.* DOI
[2]Acevedo, S. and Lamas, C. A. and Arlego, M. and Pujol, P. *Magnon crystals and magnetic phases in a kagome-stripe antiferromagnets.* DOI
[3] Acevedo, S. and Pujol, P. and Lamas, C. A. *Current jumps in flat-band ladders with Dzyaloshinskii-Moriya interactions* DOI

Solitones fuera del equilibrio en poliacetileno

• Leandro Manuel Arancibia,[1,2] Alejandro Martín Lobos[1,2]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad Nacional de Cuyo*
[2] *Instituto de Ciencias Basicas, Universidad Nacional de Cuyo- CONICET*

Los polímeros conductores han acaparado la atención de la comunidad físico-química desde su descubrimiento en la década del 70 hasta la fecha [1]. Importantes contribuciones teóricas (excitaciones topológicas no lineales, tales como solitones, polarones, y bipolarones), experimentales (síntesis de polímeros en soluciones y superficies) e industriales (celdas foto-voltaícas, LED's orgánicos, etc.) han contribuido a generar una verdadera revolución en los campos de la física y la química. En este trabajo, exploramos el modelo de Su-Schrieffer-Heeger (SSH) [2] sometido a la acción de un campo eléctrico externo, y estudiamos la estabilidad de solitones fuera de equilibrio en una molécula de poliacetileno. Para ello, resolvemos autoconsistentemente las ecuaciones dinámicas del sistema acoplado de electrones e iones, y obtenemos diferentes observables (tales como la densidad electrónica y el perfil de deformaciones a lo largo de la cadena), como función de los parámetros microscópicos del modelo.

Referencias:

[1] Heeger, A. J. *Nobel lecture: Semiconducting and metallic polymers: The fourth generation of polymeric materials*, Rev. Mod. Phys. **73**, 681 (2001).
[2] Heeger, A. J., Kivelson, S., Schrieffer, J. R., and Su, W. P. *Solitons in conducting polymers*, Rev. Mod. Phys. **60**, 781 (1988).

Efecto Hall anómalo en MnAs: Contribución intrínseca debida a la curvatura de Berry

• Marina Tortarolo,[1] Christian Helman,[2] Alberto Camjayi[3]

[1] *INN-CONICET*
[2] *INN, Centro Atómico Bariloche - CONICET - Comisión Nacional de Energía Atómica*
[3] *Instituto de Fisica de Buenos Aires y Departamento de Fisica, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires*

Presentamos un estudio teórico y experimental sobre el efecto Hall anómalo (EHA) en capas epitaxiales de MnAs crecidas sobre GaAs, con el objetivo de identificar la contribución intrínseca al EHA, que puede ser evaluada usando métodos de cálculo de estructura electrónica ab initio. Nuestras mediciones de magneto transporte muestran un comportamiento cuadrático de la resistividad Hall con la resistividad longitudinal, característica de los procesos independientes de scattering, lo que permite la comparación con cálculos ab initio. La contribución debida a la curvatura de Berry calculada está cuantitativamente en acuerdo con el EHA medido en estas capas epitaxiales. Además, la dependencia anisotrópica del EHA observada en los experimentos es bien reproducida por los cálculos.

Acoplamiento Electro-nuclear entorno a un Punto Crítico Cuántico

• Julián Gustavo Sereni[1]

[1] *Laboratorio de Bajas Temperaturas del Centro Atomico Bariloche (CNEA)*

Al enfriar un sistema magnético, la efectividad de la 3ra Ley se manifiesta en la evolución de su comportamiento ligado a la coacción de llevar su entropía S = 0 para T = 0, siendo las interacciones: $J_R(S_{4f} * S_{4f})$ o $J_K(S_{4f} * S)$ las que permiten condensar los grados de libertad hacia un estado fundamental singlete.
De no conseguirlo a través de algún ordenamiento, el sistema suele acceder a fases exóticas o a la formación de quasi-partículas (dímeros, skyrmions, solitones chirales, pares de cooper, etc). Si el sistema esta sintonizado en el entorno de un Punto Crítico Cuántico puede llegar a los 100mK sin que dichas interaciones hayan encontrado un estado electrónico de menor entropía. Este contexto favorece el acoplamiento con los momentos nucleares: $A_{hf}(I * J)$ [Eisenlohr and Vojta; Phys Rev. B 103 (2021) 064405].
En esta presentación se analizará el comportamiento del $YbCu_{4.}6Au_{0.}4$ [Curlik et al; Phys. Rev. B 90 (2014) 224409 . El cual, por ser magnéticamente frustrado a causa la coordinación tetrédrica de los átomos de Yb, no presenta orden magnético ni apantallamiento tipo Kondo hasta T = 100mK. La resonacia de muones muestra [Carretta et al. , Phys. Rev. B 79 (2009) 020401(R)] la presencia de acople electro-nuclear en sus isótopos Yb(171) e Yb(173) junto con una señal magnética record en ese rango de temperatura.

Desde la ciencia básica a la aplicación: desarrollo de un kit de extracción de ácidos nucleicos basado en el uso de nanopartículas magnéticas con aplicación a diagnóstico de COVID-19

• Claudia Rodríguez Torres[1]

[1] *Instituto de Física La Plata (CONICET/ UNLP), La Plata, Argentina*

Dada su eficiencia y confiabilidad, la reacción en cadena de la polimerasa con transcripción inversa en tiempo real (RT-qPCR) es el método de elección para el diagnóstico de enfermedad por coronavirus (COVID-19), causada por el coronavirus emergente SARS- CoV2. Un requisito necesario en el diagnóstico por PCR es la separación del RNA (ácido ribonucleico) viral proveniente de las muestras de pacientes. Esta purificación se logra con la elección adecuada de un método que separa el RNA de las proteínas, polisacáridos y lípidos normalmente presentes en la muestra biológica. En la actualidad se recomiendan para este paso distintos kits comerciales, la mayoría de ellos importados los cuales implementan métodos laboriosos y caros para el procesamiento de las muestras, basados en el uso de membranas o columnas de sílice. Una opción atractiva para separar RNA viral se basa en el procedimiento de separación en fase sólida magnética mediante el uso de nanopartículas partículas magnéticas (NPM). El uso de este método en el aislamiento de ácidos nucleicos ofrece la ventaja frente a otros métodos existentes de posibilitar la automatización del proceso. El procedimiento de extracción por este método incluye etapas de inmovilización rápida y eficiente de las moléculas de RNA sobre la superficie de las NPM y la posterior aplicación de campos magnéticos lo cual permite separar de forma rápida y eficiente los ácidos nucleicos evitando los pasos de centrifugación. El cambio en la concentración de sales en el medio permite una elución eficiente para los posteriores pasos de amplificación por el método de elección. En esta charla se contará cómo fue el proceso de desarrollo de un kit de extracción de RNA basado en el procedimiento de separación en fase sólida magnética. Se describirán los antecedentes del método, el desarrollo del kit y su validación en laboratorios de diagnóstico de la Provincia de Buenos Aires.

Simulación de defectos cristalinos en Zr mediante potenciales interatómicos de muchos cuerpos

• Julián R. Fernández[1,2]

[1] *CONICET*
[2] *Comisión Nacional de Energía Atómica Instituto Sábato Universidad Nacional de Gral. San Martín*

El Zr es un metal muy usado en aleaciones en la industria nuclear por sus propiedades mecánicas y térmicas, resistencia a la corrosión y baja sección eficaz de captura neutrónica. La irradiación a la que se ve sometido durante el servicio genera pares de Frenkel, es decir, un autointersticial más una vacancia. Estos defectos pueden migrar acumulándose en sumideros (superficie, bordes de grano, interfases, etc.), produciendo el fenómeno de crecimiento por irradiación. En su migración, vacancias y autointersticiales también pueden agruparse entre sí y formar otros defectos de mayor tamaño (aglomerados) que interactúan con dislocaciones, modificando las propiedades mecánicas de la aleación. El modelado clásico de estos defectos a escala atómica brinda la posibilidad de caracterizarlos en un detalle difícil de lograr experimentalmente y sin entrar en las complicaciones que exige un cálculo de primeros principios. En el presente trabajo se consideran dos modelos diferentes del tipo Átomo Embebido Modificado o MEAM (el modelo original de Baskes [1] y una variante de éste con funciones más flexibles [2]) y se evalúa su capacidad para reproducir características de la aglomeración de defectos puntuales, además de otras propiedades. Los potenciales tipo MEAM constituyen una mejora al EAM tradicional, puesto que involucran dependencias angulares, necesarias para representar el carácter covalente de la interacción atómica en algunos metales. Se encuentra que los resultados hallados para uno de los potenciales obtenidos aproximan mejor algunos resultados experimentales y cálculos de primeros principios cuando se compara con un modelo EAM muy usado en la literatura para este metal [3].

Referencias:

[1] M. I. Baskes, Phys. Rev. B **46**, 2727 (1992).
[2] T. J. Lenosky, B. Sadigh, E. Alonso, V. V. Bulatov, T. Díaz de la Rubia, J. Kim, A. F. Voter, and J. D. Kress, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **8**, 825 (2000).
[3] M. I. Mendelev, and G. J. Ackland, Philos. Mag. Lett. **87**, 349 (2007).

Simulación del ciclo de histéresis de nanopartículas de Fe

• Gonzalo Dos Santos,[1] Julien Tranchida,[2] Federico Romá,[3] Romina Aparicio,[1] Eduardo Bringa[1]

[1] *Facultad de Ingeniería, Universidad de Mendoza*
[2] *Computational Multiscale, Center for Computing Research, Sandia National Laboratories*
[3] *Instituto de Física Aplicada,CONICET-UNSL*

Las nanopartículas (NP) magnéticas son de interés en tecnología, incluyendo áreas como biomedicina y computación cuántica. Simulaciones de dinámica spin-red ("Spin-Lattice Dynamics", SLD), es decir simulaciones atomísticas de dinámica de spin, acopladas a simulaciones de "molecular dynamics" (MD), se han utilizado para estudiar propiedades magnéticas de NP esféricas de Fe en función de la temperatura y el diámetro de las NP [1], sin campo magnético externo. En el presente trabajo se han calculado con SLD los ciclos de histéresis magnética en nanopartículas de Fe, incluyendo anisotropía magnetocristalina cubica. Las NP son esféricas, monocristalinas y monodominio. El campo magnético de amplitud variable se aplica a lo largo de su eje [001]. Se han considerado diámetros de 2-20 nm, y se presenta el campo coercitivo y el área del ciclo para una temperatura de spin-red de 300 K, por debajo de la temperatura de Curie (T_C). Nuestras simulaciones muestran un comportamiento del campo coercitivo creciente con el diámetro, como era de esperarse. Se consideran cambios en anisotropía efectiva, intercambio efectivo, frecuencia de ciclado, etc. También discutimos resultados preliminares a otras temperaturas. Los resultados se comparan con predicciones del modelo de Stoner-Wohlfarth, que predice un ciclo rectangular para el caso simulado, y se analizan a la luz de los cambios en las configuraciones atomísticas de los spines con el ciclado del campo magnético externo.

Referencias:

[1] G. Dos Santos *et al*, Phys. Rev. B **102**, 184426 (2020).

Estudio computacional del efecto de las interacciones líquido/superficie en procesos difusivos de alcanos confinados en mesoporos de sílica

• Ignacio José Chevallier-Boutell,[1,2] Gustavo Alberto Monti,[1,2] Rodolfo Héctor Acosta,[1,2] Jimena Anahí Olmos-Asar,[3,4] María Belén Franzoni[1,2]

[1] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*
[2] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*
[3] *Instituto de Investigaciones Físico-Químicas de Córdoba, CONICET-UNC*
[4] *Departamento de Química Teórica y Computacional, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina.*

En la actualidad existe gran interés científico y tecnológico en caracterizar sistemas mesoporosos de sílica, cuyas aplicaciones van desde soportes para catálisis heterogénea y materiales de empaquetamiento para procesos de separación hasta vehiculización de drogas, macromoléculas o incluso células. Las aplicaciones mencionadas requieren, entre otras cosas, del conocimiento del transporte molecular dentro de las estructuras porosas, siendo la difusión una de las propiedades más relevantes.

El confinamiento de líquidos dentro de materiales modifica propiedades observables tales como la relajación de espín y la difusión efectiva, lo cual resulta muy beneficioso para caracterizar la morfología del sistema poroso de manera no invasiva, por ejemplo, a través de experimentos de Resonancia Magnética Nuclear.

Debido a su hidrofobicidad, los alcanos son muy utilizados como sonda para medir tortuosidades geométricas de matrices polares ya que suponen una interacción nula con la superficie [1]. En este trabajo, los resultados de cálculos *ab initio* muestran una interacción no despreciable de los alcanos, sean cíclicos o lineales, con la pared de mesoporos de sílica [2]. Además, se observa dependencia de la energía de adsorción con la longitud y la forma moleculares. Para estudiar cómo el confinamiento afecta la difusión, se propone un modelo geométrico que, junto al cálculo de energías de adsorción, nos permite determinar una energía de adsorción pesada por la fracción de moléculas que reside cerca de la pared del poro. De esta manera, se pudo establecer la dependencia entre la energía pesada y el diámetro del poro, observándose cómo ésta correlaciona con los coeficientes de difusión restringida obtenidos previamente en experimentos de RMN [3]. Concluimos que la determinación de la tortuosidad geométrica del sistema a través de los experimentos de RMN no es precisa para poros cuyos diámetros sean menores que los 6 nm, aproximadamente.

Referencias:

[1] D'Agostino C. *et al.*, Phys. Chem. C, **116**, 8975 (2012).
[2] Chevallier-Boutell IJ *et al.*, Microporous and Mesoporous Mater. (2021). DOI
[3] Garro Linck L *et al.*, Microporous and Mesoporous Mater. **305**, 110351 (2020).

Dinámica y estructura de la cristalización del agua: simulaciones con TIP4P y TIP4P2005

• Carlos Gaston Ferrara,[1,2] Tomas Grigera,[1] Valentin Attarantato,[3] Pedro Jose Didone[3]

[1] *Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos, CONICET-UNLP*
[2] *Instituto de Ingeniería y Agronomía, Universidad Nacional Arturo Jauretche*
[3] *Facultad de Ciencias Exactas - Universidad Nacional de La Plata*

En el presente trabajo realizamos un estudio de los cambios que se producen en la dinámica y estructura del agua líquida en su transición hacia la formación de cristales de hielo en presencia de semillas de cristalización. Para estudiar este problema a partir de simulaciones por Dinámica Molecular (MD) se utilizaron dos modelos de agua diferentes, TIP4P y TIP4P2005, ambos modelos de cuatro puntos y en todos los casos se colocó una semilla de cristalización de iguales características. Se analizó y caracterizó el comportamiento dinámico y estructural del agua en diferentes condiciones termodinámicas, a partir de diferentes variables, como son la distribución de puentes de hidrógeno, perfil de densidad, coeficiente de autodifusión, desplazamiento cuadrático medio o parámetros de orden. Todas las simulaciones se realizaron utilizando la técnica de dinámica molecular (MD), implementada con el paquete de GROMACS (GROningen MAchine for Chemical Simulations).

Alineación de bandas en la interfaz $SrTaO_2N$ / H_2O, para la disociación de la molécula de agua mediante cálculos de primeros principios

• Ruby Bastidas Briceño,[1,2] Victoria Fernández,[2,3] Roberto Alonso[1,2,4]

[1] *Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata*
[2] *Instituto de Física de La Plata, CONICET*
[3] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata*
[4] *Instituto de Ingeniería y Agronomía, Universidad Nacional Arturo Jauretche*

La disociación fotocatalítica de la molécula de agua atrajo en las últimas dos décadas un enorme interés en la industria de la producción de hidrógeno. En este trabajo se estudia el alineamiento de las bandas de valencia y de conducción de la interfaz (001) $SrTaO_2N/H_2O$, el cual resulta clave para el funcionamiento de las celdas fotoelectroquímicas. Los cálculos se realizaron con métodos de primeros principios y, en vista de que los métodos convencionales (LDA, GGAs, etc.) no dan buenos resultados para la energía de los estados excitados, claves en esta problemática, se ha usando el potencial de Becke-Johnson (BJ), obteniendo resultados en muy buen acuerdo con los datos experimentales del lado semiconductor. Asimismo, en virtud de la complejidad de cálculo dada por la gran cantidad de átomos necesarios para representar esta interfaz, se realizó el estudio para diferentes espesores de la estructura en dirección z, lo que permite observar la convergencia del modelo utilizado.

Estudio de películas delgadas de Sn-Sb-Te mediante técnicas de análisis superficial, hiperfinas y métodos de primeros principios. Estructura, composición química y el rol de la oxidación

• Vitaliy Bilovol,[1] Hugo Medina Chanduví,[2] Arles Gil Rebaza,[2] Azucena Mudarra Navarro,[2] Leonardo Errico[3,4]

[1] *Laboratorio de Solidos Amorfos, Facultad de Ingenieria - Universidad de Buenos Aires*
[2] *Instituto de Física, Facultad de Cs. Exactas, Universidad Nacional de La Plata*
[3] *Universidad Nacional del Noroeste Bonaerense*
[4] *Instituto de Física de La Plata, Dpto. de Física, FCE - UNLP*

Los materiales basados en calcogenidos presentan un gran interés tecnológico, sobre todo cuando sus dimensiones se reducen a películas. Ejemplo de estas aplicaciones son las llamadas memorias basadas en el fenómeno de cambio de fase reversible de alta frecuencia (PCM). Por este motivo, en los últimos años se han llevado a cabo muchos estudios de este tipo de películas a fin de predecir sus propiedades o tener control sobre las mismas.
Dentro del conjunto de materiales con potencial aplicación en PCMs, el sistema $Ge_2Sb_2Te_5$ (GST) ha concentrado buena parte del interés científico. Las películas delgadas de GST presentan una fase cúbica metaestable intermedia desde la cual se produce la transición reversible de alta frecuencia amorfo-cristalino, que es la transición de interés en el caso de PCMs. En este proceso, la temperatura de cristalización, T_C, juega un rol crítico. La T_C puede alterarse con el agregado de impurezas como O, N, o C y el funcionamiento de los dispositivos puede verse afectado por la presencia de estas impurezas, sobre todo O, y es sabido que las películas de GST expuestas a la atmósfera sin protección presentan procesos de oxidación y una T_C menor.
En forma similar al GST, el sistema Sn-Te-Sb (SST) presenta una fase cúbica metaestable cuando se produce la transición amorfo-cristalino y una T_C adecuada para su aplicación en dispositivos PCM. Por esto, el SST ha recibido una creciente atención. Sin embargo, aún quedan muchas cuestiones abiertas y para dilucidar las propiedades de las películas de SST, la comprensión detallada de su composición química y su estructura es de fundamental importancia.
En esta comunicación presentamos un estudio teórico-experimental de películas delgadas de Sn-Sb-Te con composición nominal $SnSb_2Te_4$ obtenidas por deposición láser pulsada sobre un substrato de mylar. Experimentalmente, las películas se estudiaron mediante espectroscopía Mösbauer (EM) con la sonda 119Sn, XPS y difractometría de rayos X rasantes (GIXRD). GIXRD muestra que las películas obtenidas adoptan la estructura cúbica tipo Na-Cl (Fm-3m), sin la presencia (en los límites de detección) de otras fases. 119Sn-EM revela la presencia de dos especies de Sn: Sn(II), como se espera para la fase $SnSb_2Te_4$, y Sb(IV), lo que sugiere oxidación del Sn. Los resultados XPS indican la oxidación de Sn, Sb y Te en la superficie y la progresiva eliminación de los óxidos Sn-O y Sb-O en función de la profundidad en la película. Los perfiles de concentración en profundidad muestras un fuerte déficit de Te en las muestras. Desde el punto de vista teórico, cálculos basados en la teoría de la funcional densidad soportan la hipótesis que el Sn se localiza en la subred de Sb y que se forman vacancias de Sb y Te. A partir de la comparación entre los resultados de 119Sn-EM para el corrimiento isomérico y los obtenidos teóricamente es posible confirmar que los sitios de vacancia de Te son ocupados por átomos de oxígeno durante el proceso de oxidación de la película de Sn-Sb-Te, dando soporte a la hipótesis que la fracción de Sn(II) corresponde a Sn en sitios Sb que tienen (al menos) un oxígeno como primer vecino. Finalmente, nuestros resultados teóricos muestran que la presencia de oxígeno en los sitios de vacancia de Te vuelven al sistema Sn-Sb-Te semiconductor (gap del orden de 0.3 eV).

Fuerzas inducidas por corriente en rotores moleculares Brownianos

• Federico D. Ribetto,[1,2] Sebastián E. Deghi,[2] Hernán L. Calvo,[2] Raúl A. Bustos-Marún[2,3]

[1] *Departamento de Física - Universidad Nacional de Río Cuarto*
[2] *Instituto de Física Enrique Gaviola (CONICET-UNC)*
[3] *Facultad de Ciencias Químicas - Universidad Nacional de Córdoba*

En la actualidad el avance de la nanotecnología ha impulsado el desarrollo de dispositivos nanométricos que pueden consistir de moléculas individuales y funcionar, por ejemplo, como un motor eléctrico. Estos motores moleculares consisten en moléculas asimétricas adsorbidas a un sustrato, las cuales requieren de un acople con una fuente externa de energía para poder girar sobre un dado eje. Esta energía puede ser provista por el paso de un flujo de electrones proveniente de la punta de un microscopio STM, dispositivo que puede ser utilizado en simultáneo para observar las rotaciones [1,2].
El principio de funcionamiento de este tipo de sistema es el mismo que el de los denominados motores Brownianos [3], y se basa en una combinación de potenciales asimétricos y eventos aleatorios de tuneleo inelástico de electrones. Sin embargo, dado que hay corrientes eléctricas involucradas en el proceso y teniendo en cuenta que estas pueden inducir fuerzas no-conservativas en sistemas nanométricos [4,5,6], resulta interesante entonces preguntarse sobre el rol de las llamadas fuerzas inducidas por corriente (FICs) en estos rotores moleculares.
En este trabajo adoptamos un enfoque de ecuación de Langevin y tomamos la base teórica de los motores Brownianos para desarrollar un modelo simple capaz de reproducir resultados de un trabajo experimental sobre rotores moleculares [1]. Estos incluyen tanto la direccionalidad del rotor como los histogramas que describen la distribución angular de sus rotaciones. Para estimar el rol de las FICs se estudió un modelo Hamiltoniano mínimo cuyos parámetros fueron ajustados para reproducir la variación de las corrientes (medidas experimentalmente) en función de la posición del rotor. Nuestros resultados indican que si bien la contribución no conservativa de las FICs es pequeña, estas producen una distorsión importante tanto en la direccionalidad como en la distribución de rotaciones. De acuerdo a esto, la inclusión de FICs en el modelado de rotores moleculares impulsados por corrientes resultaría fundamental para una completa descripción del fenómeno.

Referencias:

[1] H. Tierney, C. Murphy, A. Jewell. *et al.*, *Experimental demonstration of a single-molecule electric motor*, Nature Nanotech. **6**, 625–629 (2011).
[2] C. Murphy & C. Sykes, *Development of an electrically driven molecular motor*, Chem. Rec. **14**, 834 (2014).
[3] P. Hänggi & F. Marchesoni, *Artificial Brownian motors: Controlling transport on the nanoscale*, Rev. Mod. Phys. **81**, 387- (2009).
[4] F. D. Ribetto, R. A. Bustos-Marún & H. L. Calvo, *Role of coherence in quantum-dot-based nanomachines within the Coulomb blockade regime*, Phys. Rev. B. **103**, 155435 (2021).
[5] S. E. Deghi, L. J. Fernández–Alcázar, H. M. Pastawski & R. A. Bustos–Marún, *Current-induced forces in single-resonance systems*, J. Phys.: Condens. Matter **33**, 175303 (2021).
[6] R. A. Bustos–Marún, G. Refael & F. von Oppen, *Adiabatic Quantum Motors*, Phys. Rev. Lett. **111**, 6 (2013).

Una aproximación al desarrollo tecnológico

• Hernán Pastoriza[1]

[1] *Centro Atomico Bariloche - Comisión Nacional de Energía Atómica*

¿Cómo se llega de estudiar la física de vórtices superconductores al desarrollo de dispositivos médicos? ¿Sirven las herramientas que aprendemos y manejamos como físicos para abarcar el desarrollo tecnológico? ¿Son suficientes?
Como físico me he dedicado (ya aun lo hago) a la investigación de distintos fenómenos físicos de la materia condensada, en particular superconductividad y un poco de sistemas magnéticos. En los últimos años me he involucrado en el desarrollo de distintos dispositivos para su aplicación en otras áreas como la salud.
En esta charla relataré un poco mi experiencia, algunos resultados y perspectivas a futuro.

Dependencia de la forma anisotrópica en la respuesta dinámica por FMR en nanohilos de Co con sección transversal poligonal

• Francisco Merlotti,[1] Fabrizio Pusiol,[1] Fernanda Fushimi,[1] Martin Broens,[1] Naren Rojas Franco,[1] Franco Mélica,[2] Omar Ezequiel Linarez Pérez,[2,3] Diana Arciniegas Jaimes,[1] Marcelo Salguero,[4] Noelia Bajales Luna,[1,4] Juan Escrig,[5,6] Eduardo Saavedra[6]

[1] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*
[2] *Facultad de Ciencias Químicas - Universidad Nacional de Córdoba*
[3] *Instituto de Investigaciones Físico-Químicas de Córdoba, CONICET-UNC*
[4] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*
[5] *Centro para el Desarrollo de la Nanociencia y la Nanotecnología, Universidad de Santiago de Chile, Chile.*
[6] *Universidad de Santiago de Chile, Santiago, Chile*

La contribución experimental de Griffith en 1946 acerca de la resonancia ferromagnética (FMR por sus siglas en inglés) ha venido tomando relevancia el último tiempo para investigar las propiedades magnéticas de sistemas micro y nanométricos que pueden ser usados en aplicaciones tales como filtros de frecuencia [1], guías de onda [2], desplazadores de fase [3], transistores [4] y dispositivos lógicos [5]. Estas aplicaciones son posibles gracias a la exploraciones y control de la dinámica de la magnetización en nanoestructuras mediante campos de microondas. Un ejemplo particular de este tipo de nanoestructuras magnéticas son los nanohilos con sección transversal circular, cuya resonancia ferromagnética muestra generalmente dos picos bien definidos [6]. El pico ubicado a frecuencias altas tiene una absorción que depende de la relación de aspecto del nanohilo. Esta característica sugiere el uso de estos como filtros de microondas ajustables al largo del nanohilo, sin embargo, las propiedades dinámicas que dependen de la forma anisotrópica (sección transversal) de estas nanoestructuras aún no han sido investigadas. Con el objetivo de estudiar la dependencia de la forma anisotrópica en la respuesta magnética dinámica por FMR de nanohilos de Cobalto (Co), se simularon con el software libre Object Oriented MicroMagnetic Framework (OOMMF) [7] tres nanohilos con diferentes relaciones de aspecto y secciones transversales: triangular, cuadrada y circular. La dinámica por FMR se efectuó de la siguiente manera: Primero se obtuvieron las configuraciones de mínima energía que luego fueron perturbadas mediante la aplicación de un pulso magnético débil perpendicular al eje del nanohilo. A continuación, se calculó la susceptibilidad dinámica de los nanohilos como función de su relación de aspecto a partir de la Transformada Rápida de Fourier. Se encontraron dos frecuencias de FMR bien diferenciadas: una a baja frecuencia, correspondiente a la perturbación de los extremos axiales del hilo, y otra a altas frecuencias, que se atribuyó a la perturbación de los momentos alojados en la zona central del hilo. Además, a través de los espectros de susceptibilidad magnética, se encontró que la señal de baja frecuencia disminuye en intensidad con la relación de aspecto, manteniendo fija su posición espectral. Contrariamente, la señal correspondiente al modo de alta frecuencia exhibe un desplazamiento hacia valores de frecuencia más altos, así como también una mayor intensidad, a medida que la relación de aspecto incrementa. Estos resultados indican que las propiedades magnéticas descritas están determinadas por la contribución relativa de diferentes términos morfológicos, como la geometría y la relación de aspecto.

Referencias:

[1]S.-K. Kim, K.-S. Lee, D.-S. Han, Appl. Phys. Lett. **95**, 082507 (2009).
[2] V.E. Demidov, M.P. Kostylev, K. Rott, J. Münchenberger, G. Reiss, and S.O. Demokritov, Appl. Phys. Lett. **99**, 082507 (2011).
[3] Y. Au, M. Dvornik, O. Dmytriiev, V.V. Kruglyak, Appl. Phys. Lett. **100**, 172408 (2012).
[4] A.V. Chumak, A.A. Serga, B. Hillebrands, Nature Comm. **5**, 4700 (2014).
[5] T. Schneider, A.A. Serga, B. Leven, B. Hillebrands, R.L. Stamps, M.P. Kostylev, Appl. Phys. Lett. **92**, 022505 (2008).

[6] N. Dao, M.J. Donahue, I. Dumitru, L. Spinu, S.L. Whittenburg, J.C. Lodder, Nanotechnology **15**, S634 (2004).
[7] M. Donahue, D.G. Porter, NIST Interagency Report No. 6376. National Institute of Standard and Technology, Gaithersburg, MD, 1999. OOMMF

Estudio del comportamiento memristivo en films bicapa TiO_x/TaO_y

• Rodrigo Ernesto Leal Martir,[1,2] Cristian Ferreyra,[1] Myriam Aguirre,[3] Maria José Sanchez,[4] Diego Rubi[1]

[1] *Instituto de Nanociencia y Nanotecnología CAC, CNEA-CONICET*
[2] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*
[3] *Instituto de Nanociencia de Aragón, Universidad de Zaragoza, Zaragoza, España*
[4] *Instituto de Nanociencia y Nanotecnología, CONICET–CNEA, Centro Atómico Bariloche*

Los memristores son estructuras metal/aislante/metal capaces de cambiar su resistencia eléctrica entre distintos estados no volátiles en respuesta a la aplicación de un estímulo eléctrico [1] y presentan gran interés tecnológico por su potencial como memorias RRAM y dispositivos de cómputo neuromórfico [2]. Entre los sistemas memristivos más prometedores están los basados en óxidos de metales de transición simple [3]. Existe amplio consenso en que la electromigración y difusión de vacancias de oxígeno (VO) juegan un rol determinante en el cambio resistivo. En base a esto se desarrolló el modelo VEOV, el cual simula la electromigración de VO dentro del dispositivo y permite obtener la respuesta en resistencia ante distintos protocolos de estímulo eléctrico [4]. Hasta ahora se han considerado en general los sistemas memristivos como "cerrados", es decir se desprecian efectos de intercambio de oxígeno entre el dispositivo y el ambiente. En este trabajo adaptamos el modelo VEOV para el estudio de un sistema bicapa TiO_x/TaO_y buscando reproducir la respuesta eléctrica experimental. Las simulaciones realizadas, junto a experimentos de TEM, sugieren que para poder entender el proceso de electroformado es necesario incorporar el intercambio de VO con el ambiente, mientras que este intercambio parece suprimirse cuando el dispositivo funciona en régimen durante el ciclado. Nuestro trabajo aspira a contribuir al diseño optimizado de dispositivos memristivos robustos y fiables.

Referencias:

[1] R. Waser, R. Dittmann, G. Staikov, and K. Szot, Adv. Mater. **21**, 2632 (2009).
[2] S. Yu, *Neuro-inspiring computing using resistive synaptic devices*, Springer International Publishing, (2017).
[3] C. Ferreyra et. al. Nanotechnology **31**, 155204 (2020).
[4] M. J. Rozenberg, M. J. Sánchez, R. Weht, C. Acha, F. Gomez-Marlasca, and P. Levy, Phys. Rev. B **81**, 115101 (2010).

Propiedades magnetoelásticas de la aleación $CeCo_{0.7}Fe_{0.3}Si$

• Víctor Félix Correa,[1,2] Ivana Curci,[2] Christoph Geibel,[3] Julián Sereni[1,2]

[1] *Centro Atomico Bariloche - Comisión Nacional de Energía Atómica*
[2] *Instituto Balseiro - Universidad Nacional de Cuyo*
[3] *Max-Planck-Institute for Chemical Physics of Solids, Dresden, Germany*

En este trabajo se estudiaron policristales de la aleación $CeCo_{0.7}Fe_{0.3}Si$ a bajas temperaturas y campos magnéticos elevados. Se realizaron mediciones de magnetización empleando un magnetómetro de SQUID, y se realizaron mediciones de expansión térmica y magnetostricción con un dilatómetro capacitivo. A pesar de no existir orden magnético de largo alcance, ambos experimentos evidencian la existencia de correlaciones antiferromagnéticas residuales. La magnetización de altas temperaturas (T $>$ 100 K) ajusta con el modelo de Curie-Weiss. La magnetostricción lineal de bajas temperaturas es bastante elevada ($\Delta L/L = 10^{-3}$ en 16 Tesla), aunque menor que para muestras con concentraciones ligeramente menores de Fe. Pequeños cambios de valencia inducidos por el campo magnético explican este resultado. El coeficiente de expansión térmica, positivo a campo nulo, cambia de signo a medida que el campo magnético aumenta.

Manifestaciones novedosas del efecto Kondo en sistemas de átomos y moléculas con espín $S > 0$ sobre superficies metálicas

• Armando Aligia[1]

[1] *Centro Atómico Bariloche, CNEA, CONICET, S. C. de Bariloche, Río N*

Luego de una introducción al efecto Kondo, explicaré brevemente las principales teorías que explican la presencia de un pico o un valle en la conductancia diferencial dI/dV para voltaje V=0, observada en experimentos con el microscopio electrónico de barrido. Recientemente, al reinterpretar experimentos en el sistema de un átomo de Co sobre la superficie Cu(111), en los cuales se mide tanto un valle para voltajes cercanos a cero, como una resonancia cerca del fondo de la banda de superficie, vemos que contrariamente a lo sostenido anteriormente, la punta del microscopio "ve" esencialmente a los electrones s del Co y el valle se debe a efectos de interferencia [1]. Esto se ve confirmado por cálculos recientes [2]. Por otro lado, hemos comprobado con otros cálculos teóricos [3], que sistemas de espín 1 con anisotropía presentan una transición topológica cuántica como función de la anisotropía D(SZ)2 de un régimen de un líquido de Fermi ordinario a otro que no se conecta adiabáticamente a uno no interactuante en función de D. Creemos que la ftalocianina de Fe corresponde a esta descripción, la cual permite entender varios resultados experimentales relevantes [4].

Referencias:

[1] J. Fernández, P. Roura-Bas, and A. A. Aligia, Phys. Rev. Lett. **126**, 046801 (2021).
[2] M. S. Tacca, T. Jacob, and E. C. Goldberg, Phys. Rev. B **103**, 245419 (2021).
[3] G. G. Blesio, L. O. Manuel, P. Roura-Bas, and A. A. Aligia, Phys. Rev. B **98**, 195435 (2018), Phys. Rev. B **100**, 075434 (2019)
[4] R. Zitko, G. G. Blesio, L. O. Manuel, and A. A. Aligia, arXiv, enviado a Nature Commun.

Efecto de la curvatura de dominios magnéticos en la dinámica AC

• Pablo Domenichini,[1,2] Facundo Paris,[3] María Gabriela Capeluto,[1,2] Mara Granada,[3] J. M. George,[4] Gabriela Pasquini,[1,2] Alejandro Kolton[3]

[1] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*
[2] *Instituto de Física de Buenos Aires, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales CONICET- Universidad de Buenos Aires*
[3] *Centro Atomico Bariloche - Comisión Nacional de Energía Atómica*
[4] *Unité Mixte de Physique CNRS/THALES, Université Paris Sud 11, F-91767 Palaiseau Cedex, France*

Los dominios magnéticos en películas ultradelgadas presentan, en el régimen conocido como creep, una dinámica provocada por fluctuaciones térmicas y asociada a un desorden débil generado por defectos de la muestra. Bajo estas condiciones, puede modelarse a las paredes de dominio (PD) cómo sistemas en 1-d elásticos, en un potencial desordenado. Dada esta analogía, es de esperar que, en los dominios tipo burbuja, el sistema presente tensiones adicionales generadas por la curvatura propia del dominio. Este efecto es muy débil y por lo tanto se ve generalmente opacado por el desorden en sistemas relativamente extensos. En este trabajo, mediante la adquisición y el análisis de imágenes magneto-ópticas, mostramos que un campo magnético AC de media nula, puede generar un colapso del dominio [1], haciendo que el área se reduzca en una tasa que es posible medir. Explicamos este fenómeno a partir de un modelo analítico asociado al leve efecto de la curvatura propio de una PD circular [2].

Referencias:

[1] P. Domenichini, C. P. Quinteros, M. Granada, S. Collin, J.-M. George, J. Curiale, S. Bustingorry, M. G. Capeluto, and G. Pasquini. *Transient magnetic-domain-wall ac dynamics by means of magneto-optical Kerr effect microscopy*, Phys. Rev. B. **99**, 214401 (2019).
[2] P. Domenichini, F. Paris, M. G. Capeluto, M. Granada, J.-M. George, G. Pasquini, and A. B. Kolton. *Curvature-driven ac-assisted creep dynamics of magnetic domain walls*, Phys. Rev. B. **103**, 220409 (2021).

Estudio del acoplamiento efectivo entre skyrmiones magnéticos mediados por dinámica electrónica

• Esteban Andres Iroulart,[1,2] Héctor Diego Rosales[1,2,3]

[1] *Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos, CONICET-UNLP*
[2] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata*
[3] *Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata*

Los skyrmiones magnéticos, texturas de espín protegidas topológicamente, ganaron mucho interés en los últimos años . Tienen algunas propiedades únicas, como el movimiento tipo partícula impulsado por la corriente, y dado que está protegido topológicamente, un defecto no puede detener el movimiento de skyrmion. Hasta ahora se han observado skyrmiones en una variedad de magnetos que exhiben un alineamiento casi paralelo para espines a primeros vecinos, pero teóricamente también son posibles los skyrmiones con espines vecinos antiparalelos. Tales skyrmiones, denominados skyrmiones antiferromagnéticos, pueden permitir un control más flexible que los skyrmiones ferromagnéticos convencionales. En este trabajo, estudiamos interacciones efectivas entre diferentes tipos de skyrmiones mediadas por la dinámica de los electrones que viajan. Analizamos el comportamiento de la energía del estado fundamental electrónico y la fuerza efectiva entre los skyrmiones, generada por la dinámica electrónica, en función del llenado electrónico y la distancia entre los centros de los skyrmiones. Consideramos tres tipos de skyrmiones: ferromagnéticos, ferrimagnéticos y antiferromagnéticos, y los resultados se compararon con los de los dominios ferromagnéticos.
Por otro lado, calculamos la densidad electrónica local para todas las texturas magnéticas en función del llenado electrónico. Se podría indicar, en base a lo obtenido, que los arreglos de skyrmiones antiferromagnéticos tienden a ser más estables que las de skyrmiones o dominios ferromagnéticos. Además, mostramos que los skyrmiones antiferromagnéticos permanecen en un estado de hard-core para los electrones. En base a los resultados obtenidos, los skyrmiones antiferromagnéticos se pueden destacar por encima de otros tipos de texturas magnéticas, lo que los convierte en candidatos prometedores para el uso de dispositivos electrónicos y otras potenciales aplicaciones.

Estudio de propiedades de nano estructuras usando el método kp: caracterización de resonancias y estados topológicos

• Natalia Giovenale,[1] Omar Osenda[1,2]

[1] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*
[2] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*

El estudio de nanoestructuras de semiconductores para implementaciones tecnológicas ha adquirido mucho protagonismo en las ultimas décadas. Uno de los métodos utilizados para la caracterización de la estructura de bandas de estos sistemas es el método k.p. Dicho método permite estudiar niveles de electrón/hueco incluyendo tantas bandas energéticas como el problema a estudiar requiera, así como el spin de los electrones involucrados. El método es particularmente usado para estudiar niveles por arriba y por abajo del gap entre la banda de conducción y la de valencia. Este método también es ampliamente usado para el estudio de estados topológicos, siendo muy preciso para describir el efecto hall cuántico de spin (QHSE). El Hamiltoniano propuesto por esta aproximación permite obtener de manera relativamente sencilla los estados y espectro aproximado de una gran variedad de nanoestructuras, con o sin potenciales de confinamiento y campo magnético externo aplicado. A partir de la obtención de estos estados, es posible estudiar cantidades de información cuántica, como la entropía de von Neumann y la fidelidad, lo cual permite la caracterización de estados topológicos y resonancias en distintos sistemas. En esta presentación discutiremos las bases del método, sus aplicaciones y resultados que hemos obtenido, mostrando que permite caracterizaciones que complementan o expanden los resultados obtenidos mediante la aproximación de masa efectiva para el problema de resonancias y nuevas caracterizaciones para problemas de estados topológicos.

Cristalización de skyrmiones en la red de kagome a partir de un líquido de espín quiral

• Rosales H D,[1,2,3] Gómez Albarracín F A,[1,2,3] Jaubert L,[4] Pujol P[5]

[1] *Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos, CONICET-UNLP*
[2] *Facultad de Ingeniería - Universidad Nacional de La Plata*
[3] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata*
[4] *CNRS, Université de Bordeaux, LOMA, UMR 5798, 33400 Talence, France*
[5] *Laboratoire de Physique Théorique, IRSAMC, CNRS and Université de Toulouse, UPS, F-31062 Toulouse, France*

En los últimos años, los sistemas excitaciones topológicas han sido un tema de constante investigación en materia condensada. En este contexto aparecen los skyrmiones [1] y semi-skyrmiones (merones) [2], que son texturas magnéticas tipo vórtice con propiedades similares a partículas. Estos objetos, cuyo tamaño típico varía desde unos pocos a unos cientos de nanómetros, se han convertido en candidatos prometedores para futuras aplicaciones espintrónicas como las memorias racetrack [3]. Bajo ciertas circunstancias, los skyrmiones se pueden ordenar formando arreglos periódicos o redes de skyrmiones cuya naturaleza admite dos tipos de interpretación: o bien como una aglomeración de de cuasi-partículas dispuestas en una geometría compacta, o bien como una superposición coherente de hélices de espines. Esta doble interpretación da lugar a uno de los temas actuales más importantes a abordar es el de cómo se cristaliza una red de skymiones. En este trabajo, exploramos la aparición y estabilidad térmica de skyrmiones a partir de un fondo líquido de espín quiral como precursor de skyrmiones aislados, y su posterior cristalización. En primer lugar, empleando simulaciones numéricas de Monte Carlo a gran escala, mostramos que el efecto combinado de interacciones antisimétricas y degeneración macroscópica conduce a una gran variedad de fases topológicamente no triviales incluyendo bimerones, skyrmiones, líquidos de skyrmiones y líquidos de espín quiral. Finalmente, mostramos que el proceso de cristalización de skyrmiones posee las características presentadas en la teoría KTHNY [4] observándose una transición intermedia a una fase hexática con orden de traslación de corto alcance y cuasi-largo alcance de órden orientacional.

Referencias:

[1] Muhlbauer, S. *et al.*, *Skyrmion lattice in a chiral magnet*, Science **323**, 915 (2009).
[2] Gao, S., Rosales, H.D., Gómez Albarracín, F.A. *et al.*, *Fractional antiferromagnetic skyrmion lattice induced by anisotropic couplings*, Nature **586**, 37 (2020).
[3] Göbel, B., Schäffer, A.F., Berakdar, J. *et al.*, *Electrical writing, deleting, reading, and moving of magnetic skyrmioniums in a racetrack device*, Sci. Rep. **9**, 12119 (2019).
[4] B. I. Halperin and D. R. Nelson, Phys. Rev. Lett. **41**, 121 (1978); D. R. Nelson and B. I. Halperin, Phys. Rev. B **19**, 2457 (1979); A. P. Young, Phys. Rev. B **19**, 1855 (1979).

Estudio de las propiedades superconductoras y estructurales en la implantación de K en cristales de β-FeSe por irradiación

• Gonzalo Alfredo Mogensen,[1,2] Lucio Lanoël,[1,3] Cesar Olivares,[4] Sergio Suárez,[2,4,5] Gladys Nieva[1,2,3]

[1] *Laboratorio de Bajas Temperaturas del Centro Atomico Bariloche (CNEA)*
[2] *Instituto Balseiro - Universidad Nacional de Cuyo*
[3] *CONICET*
[4] *Laboratorio TANDEM, Centro Atómico Bariloche, Argentina*
[5] *CNEA-INTECNUS (Instituto de Tecnologías Nucleares para la Salud)*

A lo largo de los años, en la literatura se ha estudiado el sistema β-FeSe, un superconductor basado en hierro, y cómo cambian sus propiedades según el dopaje de distintos metales alcalinos, en particular con potasio que permite aumentar su temperatura crítica (Tc) de bulto de 8 K a 30 K o hasta 45 K según el dopaje. Sin embargo, los distintos métodos producción de este compuesto $K_xFe_{2-y}Se_2$ son dificultosos o generan fases espúreas.
Reportamos la implantación de iones de potasio K^{+1} en monocristales de β-FeSe por irradiación en el acelerador TANDEM, del Centro Atómico Bariloche, como un método novedoso de producción del superconductor $K_xFe_{2-y}Se_2$.
Dentro de los resultados hemos observado la presencia de superconductividad a temperaturas de $\sim$30 K en regiones minoritarias de los cristales de β-FeSe en mediciones de magnetización de bulk (con un magnetómetro SQUID). También se notaron cambios en la corriente crítica superconductora y en los parámetros estructurales.
Además de observar la presencia de superconductividad en regiones minoritarias, la irradiación generó defectos estructurales, y la presencia de una contribución magnética. Estudiamos el cambio en las propiedades luego de un recocido en las muestras para revertir los defectos inducidos.

Desigualdad creciente y redistribución de la riqueza

• José Roberto Iglesias,[1,2] Ben-Hur Francisco Cardoso,[3] Sebastián Gonçalves[1]

[1] *Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (IF-UFRGS), Porto Alegre, Brasil.*
[2] *Instituto Nacional de Ciencia y Tecnologia de Sistemas Complexos (INCT-SC), Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF), Río de Janeiro, Brasil.*
[3] *Departamento de Economia e Relações Internacionais, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC, Brasil*

La desigualdad social y económica es un flagelo del siglo XXI. La riqueza se concentra cada vez más en unas pocas manos, mientras que la gran mayoría de la sociedad comparte una cantidad muy limitada de recursos. Esta situación ha sido predicha y denunciada por econofísicos y economistas. Los primeros elaboraron modelos de dinámica de mercado que usan la idea de que una determinada distribución de bienes es el resultado de intercambios de riqueza entre agentes económicos. Una analogía simple compara el comercio en una sociedad con el intercambio de energía en las colisiones entre moléculas en un sistema físico. Sin embargo, mientras que en los sistemas físicos la equipartición de la energía es una consecuencia del caos molecular, en la mayoría de los modelos de intercambio para los mercados económicos el sistema converge a un estado "condensado" muy desigual, donde uno o unos pocos agentes concentran toda la riqueza de la sociedad y la mayoría de los agentes se queda con cero o con una fracción insignificante de la riqueza. Vamos a discutir dos formas de evitar ese estado "condensado". Por un lado, consideramos un mecanismo para favorecer a los agentes más pobres en los intercambios, aumentando así la probabilidad de que la riqueza pase del agente más rico al más pobre. Por otro lado, estudiamos una política regulatoria, es decir, diferentes tipos de impuestos y sus efectos en la distribución de la riqueza. Un punto de interés particular es comparar los planes que asisten a las familias con ingresos muy bajos o nulos, como la "bolsa família" en Brasil, o asignaciones familiares en Argentina, con una ayuda universal, e incluso con una asignación única una vez en la vida. Compararemos diferentes procesos de redistribución y concluimos que se puede obtener una reducción significativa de la desigualdad con impuestos y regulaciones muy simples.

Dinámica del interés público e influencia mediática mediante un modelo basado en umbrales

• Sebastián Pinto,[1,2] Marcos Trevisan,[1,2] Pablo Balenzuela[1,2]

[1] *Instituto de Física de Buenos Aires, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales CONICET- Universidad de Buenos Aires*
[2] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*

La formación del interés público respecto de un determinado tema es un fenómeno complejo en el cual intervienen diferentes mecanismos de interacción entre los individuos que comparten la información, así como con actores importantes como son los medios masivos de comunicación. Con la posibilidad de disponer de datos con los cuales estimar cuantitativamente dicho interés, cabe la pregunta si es posible obtener infomación sobre dichas interacciones. Una forma de abordar esta problemática es a partir del modelado de las mismas, proponiendo mecanismos de interacción que sean relevantes a la hora de reproducir el interés del público estimulado por el interés mediático.
En ese trabajo presentamos una implementación de un modelo basado en umbrales, conocido como modelo de Granovetter, en el cual incorporamos la interacción de los agentes constituyentes del sistema con un medio masivo de comunicación representado como un campo externo. Este modelo paradigmático del área de la sociofísica explica la diferencia de interés del público respecto de la cobertura mediática de un dado tópico a partir del concepto de masa crítica. Esto se refiere al hecho de que la presencia de un pequeño conjunto de individuos interesados en un tema puede disparar un interés mayoritario en el resto de los individuos, independientemente de la cobertura mediática.
A partir de medir el interés del público como la cantidad de búsquedas relativas de un determinado tema en la web y de definir la cobertura mediática como la cantidad de notas relativas dedicadas a dicho tema, encontramos que las diferencias entre el interés del público y de los medios se debe principalmente a la variación significativa de un parámetro que interpretamos como la sensibilidad media de los agentes respecto de dicho tópico. Aplicamos este modelo a datos obtenidos tanto de medios de comunicación argentinos como internacionales y contrastamos con medidas del interés público obtenidas tanto de Google Trends como de la red social Twitter.

Ensayos de cultivo de tumoresferas y ajuste de modelo matemático

• Lucía Benítez,[1,2] Lucas Barberis,[2] Luciano Vellón,[3] Carlos A. Condat[1,2]

[1] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*
[2] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*
[3] *Instituto de Biología y Medicina Experimental - CONICET*

A partir de la evidencia en cánceres hematológicos, se conoce que numerosos tumores sólidos también contienen cierto número de células, llamadas células madre cancerosas (CMCs), que se asemejan a las células madre de los tejidos normales, y que, además de compartir muchas propiedades con las células madre normales, como la capacidad de autoregenerarse y de generar células con variados grados de diferenciación, poseen también la capacidad de formar esferas en cultivos in vitro. A éstas, se las denomina tumoresferas y son utilizadas como modelo biológico para estudiar la progresión del cáncer en ausencia de tejido sano y del sistema complejo de señales que prevalecen en el ambiente en el que viven los tumores reales.
Debido a que no se acostumbra a medir experimentalmente algunos de los parámetros útiles para el modelado matemático, buscamos conseguir datos de primera mano que nos permitan estimarlos. En particular, necesitamos medir diariamente el diámetro de las tumoresferas, ya que nos interesa estimar el número de células que contiene una tumoresfera cada día.
En este trabajo les contamos cómo realizamos el experimento en colaboración con investigadores del Laboratorio de Células Madre/Stem Cells Lab del Instituto de Biología y Medicina Experimental (IBYME-CONICET) y, también cómo procesamos dichos resultados para posteriormente utilizarlos en nuestro modelo matemático de crecimiento tumoral. El mismo describe la interacción entre células de dos clases: CMCs y células cancerosas diferenciadas (CCDs). Implementado en los datos experimentales obtuvimos información sobre las interacciones intraespecíficas (entre células de la misma especie) e interespecíficas (entre células de diferente especie). Finalmente concluimos que, tal como hallamos en medios de cultivo sin suero [1], las interacciones intraespecíficas son competitivas y las interespecíficas son cooperativas. El modelo también nos permite reconstruir la evolución temporal de la fracción de células madre cancerosas, la cual no fue medida experimentalmente.

Referencias:

[1] L. Benítez, L. Barberis, L. Vellón, and C.A. Condat, *Modeling tumorspheres reveals cancer stem cell niche building and plasticity*, Phys. A **533**, 121906 (2019).

Una terapia de diferenciación para tumoresferas

• Jerónimo Fotinós,[1] Carlos A. Condat,[1,2] Lucas Barberis[1,2]

[1] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*
[2] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*

De acuerdo a la hipótesis de las células madre cancerosas (CMCs), el crecimiento de un tumor es promovido por un número relativamente pequeño de estas, que son capaces de generar células de su misma especie o células llamadas "diferenciadas", que han perdido su carácter de madres. Las CMCs son capaces de resistir a las terapias convencionales, siendo responsables de la adquisición de resistencia. En este trabajo modelamos una terapia que específicamente toma como blanco a las CMCs, basada en el uso de un agente diferenciador que fuerza a las CMCs a perder su condición de madres y diferenciarse. Mediante la extensión de un modelo de ecuaciones diferenciales ordinarias desarrollado por Benítez et al. (2019), se describe una terapia de diferenciación aplicada a una tumoresfera: un esferoide formado por células cancerosas que crece a partir de una única CMC. Se obtienen las soluciones de equilibrio y se investiga su estabilidad, además de analizarse la aplicación del modelo a casos realistas, discutiéndose cómo la terapia modifica la dinámica del sistema y destacándose la importancia del momento de su inicio.

Controlando la des-afinación entre fuentes sonoras

• Juan Francisco Döppler,[1,2] Ana Amador,[1,2] Gabriel Mindlin[1,2]

[1] *IFIBA-CONICET*
[2] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*

La sincronización es un fenómeno ubicuo, que surge en sistemas mecánicos, electrónicos, sociales, biológicos, y más. Típicamente involucra la interacción de osciladores acoplados que ajustan su ritmo para oscilar de forma coordinada, o para seguir a un forzante.
Un ejemplo de un sistema de osciladores acoplados se encuentra en un modelo propuesto para la fonación en benteveos [1]. Estas aves cuentan con dos fuentes sonoras, cuyas oscilaciones modulan el flujo de aire para producir sonido. Ambas fuentes pueden oscilar en sincronía mutua (produciendo sonidos tonales y de amplitud constante), o fuera de sincronía. En este régimen se produce una variación continua del desfasaje entre ambas fuentes, que se evidencia como una modulación a una frecuencia lenta (comparada con la de los osciladores individuales) de la amplitud del sonido. Por otro lado, estos osciladores se encuentran forzados por la acción de un músculo. Sin embargo, es importante notar que este forzante a su vez tiene una frecuencia característica mucho menor a las frecuencias naturales de los osciladores.
Inspirados en este problema biofísico, en este trabajo estudiamos la dinámica de un sistema de dos osciladores de fase acoplados y forzados periódicamente, en el régimen en que no se sincronizan mutuamente. En ausencia de forzante, la oscilación lenta (comparada con las frecuencias de los osciladores individuales) de su fase relativa ocurre a una frecuencia similar a la diferencia de las frecuencias naturales de los osciladores. En este trabajo demostramos que al forzar al sistema con frecuencias cercanas a esta frecuencia lenta, es posible sincronizar el desfase al forzante externo, aún cuando los osciladores individuales no se sincronizan individualmente al forzante.
En el modelo biofísico, este mecanismo dinámico provee un medio de control de la modulación de amplitud del sonido. Esta modulación, que emerge de la producción de sonido con dos fuentes desacopladas, puede ser entonces controlada de forma precisa mediante la acción de un músculo, que actúa como un forzante externo periódico.

Referencias:

[1] Döppler, J. F., Amador, A., Goller, F., and Mindlin, G. B. *Dynamics behind rough sounds in the song of the Pitangus sulphuratus*, Phys. Rev. E **102**, 062415 (2020).

Los roedores que nos rodean: Modelado de factores ambientales y biológicos determinantes de la distribución espacial de especies

• Fabiana Laguna,[1] Trinidad Ruiz Barlett,[2] Guillermo Abramson,[1] Adrián Monjeau[2]

[1] *Grupo de Física Estadística e Interdisciplinaria, Centro Atómico Bariloche - CONICET*
[2] *Fundación Bariloche-CONICET*

Los modelos de distribución de especies (MDS) desempeñan un papel importante en el estudio de los patrones de distribución de los organismos. El modelado espacial predictivo basado en el análisis de parámetros ambientales y la presencia de especies se usa ampliamente en estudios ambientales, ecológicos y de conservación [1]. Se asume que la distribución actual de una dada especie es un buen indicador de sus requerimientos ecológicos, y quizá por eso los algoritmos conocidos de extrapolación generalmente no incluyen información sobre variables bióticas. Resulta relevante entonces incorporar a los de MDS otros ingredientes que permitan un análisis más completo del ecosistema, tales como la depredación o las competencias intra e interespecíficas.
En este trabajo estudiamos doce especies de roedores sigmodontinos que habitan nuestra región. Realizamos simulaciones numéricas de la dinámica de cada especie de roedor a partir de un modelo metapoblacional estocástico y espacialmente explícito. Los parámetros utilizados se tomaron de datos recolectados para cada especie. En particular, se utilizaron mapas de distribución potencial de MaxEnt para modelar la idoneidad de cada especie, y tener así una medida de su capacidad colonizadora en cada parche. Se utilizó el índice de vegetación de diferencia normalizada (NDVI) como indicador de la cobertura vegetal en cada celda y se lo asoció a una probabilidad local de depredación. El efecto de las interacciones competitivas entre especies se tuvo en cuenta a partir de la regla de Fox, que se aplica a especies de roedores que pertenecen al mismo gremio trófico. Finalmente, se propuso como condición de ocupación inicial para cada especie los sitios de presencia conocidos y se comparó la evolución temporal de estos sistemas con la obtenida a partir de condiciones iniciales al azar. Los resultados obtenidos permiten ampliar la descripción de los ecosistemas estudiados y se espera que puedan utilizarse para modelar posibles escenarios ecológicos futuros.

Referencias:

[1] T Ruiz Barlett, GM Martin, MF Laguna, G Abramson, and A Monjeau, *Climatic constraints and the distribution of Patagonian mice*, J. Mammal. **100**, 1979 (2019).

Distribución de probabilidades de primer retorno, ley de potencia y coalescencia

• Silvia A. Menchón,[1,2] Pablo Román[2,3]

[1] *Instituto de Física Enrique Gaviola (IFEG) - CONICET - Córdoba, Argentina.*
[2] *Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación, FAMAF-UNC, Argentina*
[3] *CIEM - CONICET*

Las distribuciones de las duraciones de avalanchas en procesos con auto-criticalidad han sido relacionadas con distribuciones de primer retorno de caminatas aleatorias. Por ejemplo, se puede considerar una red discreta cuyos nodos 0, 1, 2, ... representan el número de sitios activos. En este sentido, la duración de una avalancha puede ser vista como el tiempo que le lleva al caminante regresar al origen por primera vez. En este trabajo, estudiamos las distribuciones de probabilidades de retorno al origen por primera vez, $f^{(n)}$, para caminatas aleatorias discretas con probabilidades de transición de un salto constantes. Obteniendo las expresiones explícitas, en términos de funciones hipergeométricas ${}_2F_1$, podemos determinar diferentes expresiones para n par o impar, como así también el punto de coalescencia de las dos curvas. Más aún, haciendo un análisis asintótico, podemos asegurar que el comportamiento de ley de potencia, con exponente -3/2, sólo se da cuando la distribución de probabilidad de un salto es simétrica.

Oscilaciones y sincronización neuronal en una red neuronal: el rol de los tripletes de plasticidad sináptica

• Monserrat Pallares Di Nunzio,[1] Mauro Granado,[1] Fernando Montani[1]

[1] *Instituto de Fisica La Plata, CONICET-UNLP, La Plata*

Las múltiples sensaciones que experimenta nuestro cuerpo van acompañadas de intercambios de información en forma de señales eléctricas dentro del cerebro. Estas señales eléctricas pueden ser ondas, de forma similar a como las ondas de radio se usan para emitir música desde la emisora a los usuarios. La principal diferencia con el cerebro es que las diferentes zonas el mismo pueden funcionar como emisoras o receptoras de señales dependiendo de la situación. Las oscilaciones neuronales, u ondas cerebrales, son patrones rítmicos o repetitivos de actividad neuronal en la corteza. La interacción entre las neuronas puede dar lugar a oscilaciones con una frecuencia diferente a la de disparo de las neuronas individuales que depende las posibles reglas de la fuerza sináptica entre las mismas. La sincronización en las redes neuronales ha atraído mucha atención en los últimos años, centrándose en el tipo de transiciones de los diferentes tipos de oscilaciones en la red. Que se obtenga una transición explosiva o una transición continua es una característica importante de la red neuronal que puede depender de la estructura de la red, así como de las reglas de plasticidad sináptica. En este estudio consideramos el efecto de la interacción sináptica, así como la conectividad estructural en la transición de sincronización en modelos de red de neuronas que espigan regularmente con diferentes ritmos neuronales. La fuerza sináptica deprime la activación baja y potencia la activación alta de las neuronas postsinápticas. Es importante remarcar que se ha demostrado que el STDP de tripletes describe experimentos de plasticidad que la regla STDP clásica, basada en pares de espigas, no ha podido capturar. Aquí consideramos un modelo de triplete de plasticidad dependiente de la sincronización de los picos (STDP) que depende de las interacciones de tres picos sincronizados con un network de neuronas excitatorias e inhibitorias que emulan la actividad de la corteza. Investigamos la evolución dinámica de la actividad un modelo de triplete de plasticidad dependiente de la sincronización de los picos (STDP) y lo comparamos con un modelo clásico de pares de STDP. Investigamos como el triplete STDP puede inducir selectividad para patrones de entrada que consisten en correlaciones espaciotemporales de orden superior, que existen en los estímulos naturales y se han medido en el cerebro, esta sensibilidad a las correlaciones de orden superior puede utilizarse para desarrollar la selectividad de dirección y velocidad.

Consideraciones entrópicas para describir la fase de alto cubrimiento que aparece en un sistema de varillas rígidas largas adsorbidas sobre redes en 2D

• Antonio J. Ramirez-Pastor,[1] Pedro Marcelo Pasinetti,[1] Eugenio E. Vogel,[2] Gonzalo Saravia[2]

[1] *INFAP, CONICET, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales, Universidad Nacional de San Luis*
[2] *Departamento de Ciencias Físicas - Universidad de La Frontera, Temuco, Chile*

El estudio de sistemas de varillas largas y finas en solución ha sido de gran interés para la mecánica estadística desde hace muchos años. Onsager [Ann. N. Y. Acad. Sci. 51, 627 (1949)] fue el primero en notar que, interactuando sólo a través de interacciones de volumen excluido, estos objetos presentan orden orientacional de tipo nemático a altas densidades. Posteriormente, Flory [J. Chem. Phys. 10, 51 (1942)] y Huggins [J. Phys. Chem. 46, 151 (1942)] extendieron el trabajo anterior, desarrollando la base fundamental sobre la cual el efecto de la orientación de las moléculas puede ser añadido. A pesar del esfuerzo de Flory y otros autores posteriores, la inherente complejidad de un sistema de barras rígidas sobre una red ha impedido el desarrollo de soluciones analíticas satisfactorias, apareciendo la simulación computacional como una importante herramienta para estudiar este tipo de problemas. En este sentido, un sistema de k-meros lineales sobre una red cuadrada fue estudiado por Ghosh y Dhar [Eur. Phys. Lett. 78, 20003 (2007)] mediante simulación Monte Carlo. Los autores encontraron fuerte evidencia numérica sobre la existencia de un orden nemático a densidades intermedias para tamaños $k \geq 7$ y aportaron argumentos teóricos sobre una segunda transición nemático-isotrópico (NI) ocurriendo a densidades próximas a 1. Así, a medida que aumenta la densidad, aparecen tres fases sobre la superficie para sistemas de varillas largas: una fase desordenada de baja densidad (fase D), una fase nemática de densidad intermedia (fase N) y una fase de alta densidad en la que no hay orden orientacional (fase O). Las fases D y N han sido extensivamente estudiadas en la literatura [Linares, Romá, Ramirez-Pastor, J. Stat. Mech. P03013 (2008)]. No ha ocurrido lo mismo con la fase de alto cubrimiento. En este contexto, nos proponemos en este trabajo avanzar sobre la caracterización de la fase O, usando la entropía configuracional de la fase adsorbida como principal cantidad de estudio. El abordaje del problema incluye simulaciones de Monte Carlo en la asamblea gran canónica y cálculos básicos de combinatoria.

Multiple Exclusion statistics: from single species to mixtures

• Julián José Riccardo,[1] José Luis Riccardo,[1] Antonio José Ramirez-Pastor,[1] Pedro Marcelo Pasinetti[1]

[1] *INFAP-Universidad Nacional de San Luis-CONICET*

Previously in a work of ours [1] we present a new distribution for systems of particles obeying statistical exclusion of correlated states is presented following Haldane's [1] state counting. It relies upon a conjecture to deal with the multiple exclusion that takes place when the states available to single particles are spatially correlated and it can be simultaneously excluded by more than one particle. Here we generalized our previous work to the case of having particles of multiple species also obeying to statistical exclusion of correlated states, Multiple Exclusion Statistics (ME). The ultimate aime of here is to develop a thermodynamic framework to the general problem of particles with arbitrary size/shape on a lattice assuming hard-core interactions, focusing on the mixture of species case. Our interest in generalizing Multiple Exclusion statistics to the case of multiple species is due to the intent of explaining nematic transition [2] of k-$mers$ on a square lattice rationalized as a mixture of two species, each one along a characteristic orientation on the lattice. It is explored the ability to displey the nematic transition for $k = 7$ at low density and the nematic-disordered phase at high density. Full forms of the free energy, entropy and chemical pontential are presented as functions of the density ok k-$mers$ in each characteristc direction on the lattice as well as the phase coexistence lines arising from this description proposed here ; and the state-exclusion spectrum functions shedding light on the behavior of the systems at and along the isotropic-anisotropic nematic phase transition studied here.

Referencias:

[1] J. J. Riccardo, J. L. Riccardo, A. J. Ramirez-Pastor, and P. M. Pasinetti, *Multiple Exclusion Statistics*, Phys. Rev. Lett. **123**, 020602 (2019).
[2] J. Kundu, R. Rajesh, D. Dhar, and J. F. Stilck, Phys. Rev. E **87**, 032103 (2013).

Crecimiento de una superficie durante la deposición en multicapas, aleatoria e irreversible de varillas semirrígidas rectas

• Nelphy De la Cruz,[1] Paulo Centres,[2,3] Antonio Ramirez,[3] Sebastian Bustingorry[4]

[1] *Instituto de Fisica, Universidad Autónoma de Santo Domingo*
[2] *INFAP, CONICET, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales, Universidad Nacional de San Luis*
[3] *Instituto de Física Aplicada,CONICET-UNSL*
[4] *Centro Atómico Bariloche - CONICET, Comisión Nacional de Energía Atómica*

Las propiedades de crecimiento de una superficie durante la deposición en multicapas e irreversible de varillas semirrígidas rectas sobre redes lineales y cuadradas se presentan en este estudio mediante simulaciones de Monte Carlo y consideraciones analíticas. El llenado de la red se realiza siguiendo un mecanismo de adsorción secuencial aleatorio generalizado donde los objetos depositados pueden adsorberse sobre la superficie formando multicapas. Los resultados de nuestras simulaciones muestran que la rugosidad evoluciona en el tiempo siguiendo dos comportamientos diferentes: un "régimen de crecimiento homogéneo" en los momentos iniciales, donde las alturas de las columnas aumentan de manera homogénea, y un "régimen de crecimiento segmentado" en tiempos prolongados, donde el adsorbido La fase está segmentada en columnas de crecimiento activo y sitios inactivos que no crecen. En estas condiciones, se estudia el crecimiento superficial generado por la deposición de partículas de diferentes tamaños. En tiempos prolongados, la rugosidad de los sistemas aumenta linealmente con el tiempo, con exponente de crecimiento $\beta = 1$, en variación con una deposición aleatoria de monómeros que presenta un comportamiento sublineal ($\beta = 1/2$). El comportamiento lineal se debe al proceso de crecimiento segmentado, como mostramos utilizando un modelo analítico simple.

Termodinámica de no-equilibrio: Aplicación al proceso de pre-ruptura en dieléctricos sólidos

• Adrián Razzitte,[1] María Sol Ruiz,[1] Luciano Enciso[1,1,1]

[1] *Facultad de Ingeniería Universidad de Buenos Aires*

El presente trabajo constituye un intento de modelar el proceso de ruptura dieléctrica incluyendo el efecto de la presencia de humedad, que se difunde a través de las ramas del árbol eléctrico y puede contribuir a su formación incipiente. El proceso de pre-ruptura antecede a la destrucción ocasionada por la ruptura dieléctrica, que en equipos de alta tensión, ocasiona severos daños. Existen varios modelos y teorías para comprender el origen del problema, entre ellos la generación de descargas parciales que dan lugar a la formación de micro-canales llamados árboles eléctricos. En nuestro trabajo consideramos, además, la difusión de iones formados a partir de la ionización de H2O , impulsados por un gradiente de concentración dentro de los nombrados micro-canales, que ha de acoplarse al gradiente de potencial eléctrico. Nuestro análisis se centra en la producción de entropía en el marco de la Termodinámica de No-equilibrio, teniendo en cuenta los efectos simultáneos del campo eléctrico (actuando sobre el aislante) y la difusión de iones provenientes de la ionización de H2O (dentro de los micro-canales o ramas del árbol dieléctrico). Es decir, considerando el acoplamiento de: flujo de materia-flujo de carga eléctrica mediante los coeficientes fenomenológicos de Onsager. Debido a que la ruptura dieléctrica es un claro ejemplo de proceso de no equilibrio, creemos que la originalidad de este trabajo radica en la combinación de: un modelo estocástico basado en el DBM (Dielectric Breakdown Model para la descripción del campo y el aporte puramente eléctrico) y otros efectos asociados al proceso de ruptura dieléctrica, como la conducción iónica o electrónica dentro de los micro-canales o la presencia de humedad en el material aislante y el efecto de temperatura sobre la producción de entropía.

La geometría del color

Nicolás Vattuone,[1,2] • Inés Samengo[1,2]

[1] *Instituo Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo - Comisión Nacional de Energía Atómica*
[2] *Departmento de Fisica Medica, Centro Atómico Bariloche, CNEA, CONICET*

El color con que percibimos un estímulo está solo parcialmente determinado por la composición espectral de la luz que llega del objeto analizado. El tamaño del estímulo, su estado de movimiento, así como la luminosidad y la composición cromática del entorno en que aparece (por nombrar solo algunos factores) modifican la experiencia del color. En esta charla se describen los métodos para caracterizar tal experiencia, que es privada y subjetiva, utilizando métodos objetivos y reproducibles. Construimos una geometría del espacio de colores, proponiendo un tensor métrico y una noción de distancia, ambos diseñados individualmente para cada observador, a partir de las respuestas del sujeto a experimentos psicofísicos de discriminación y matcheo. Observamos que si bien las métricas de distintos observadores tricrómatas cumplen todas con ciertas tendencias globales, existen diferencias individuales que son significativas. Con la geometría propuesta, el efecto de inducción cromática, por el cual el color de un estímulo se modifica por la cromaticidad de su entorno, se vuelve homogéneo e isotrópico. En consecuencia, nuestra geometría cumple en el espacio de colores el mismo rol que la geometría Euclídea de los sistemas de referencia inerciales cumple en la mecánica de Newton, con la que las leyes físicas (gravedad, electromagnetismo, ecuación del calor, etc.) sólo dependen de las distancias relativas entre las partículas. Este análisis revela que la experiencia perceptual, a pesar de ser sólo accesible introspectivamente, puede describirse en términos de sus simetrías fundamentales, con una adecuada elección de la métrica del espacio de perceptos.

Entropía en señales de acelerometría en enfermedad de Parkinson como emergente de un sistema en estado crítico

• Gianfranco Bianchi,[1] Daniela S. Andres[1]

[1] *Laboratorio de Neuroingeniería, Escuela de Ciencia y Tecnología, Universidad Nacional de San Martín*

Propiedades no-lineales de series temporales, como entropía, exponentes de Lyapunov o dimensiones fractales, han sido utilizadas desde hace años por diversos autores para caracterizar el comportamiento de sistemas neuronales [1,2]. A su vez el ruido de tipo $1/f$ está presente en estos sistemas, lo que al estudiar el espectro de potencias se manifiesta como la ley de potencias asociada $P(f) \propto f^{-\beta}$ a lo largo de múltiples escalas, implicando un comportamiento crítico [3,4]. En enfermedad de Parkinson las propiedades no-lineales de la actividad neuronal en los ganglios de la base muestran alteraciones típicas, asociándose al deterioro del control motor característico de la enfermedad [5]. Para estudiar la alteración de propiedades no lineales en el sistema motor en enfermedad de Parkinson, en trabajos previos generamos una base de señales acelerométricas con un sistema compuesto por una pulsera *wearable* y una aplicación móvil. Se estudiaron dos grupos de personas, uno de pacientes con enfermedad de Parkinson y otro de sujetos sanos de edades similares [6]. Medimos la ley de potencias para ambos grupos de señales, analizando el espectro en escala doble logarítmica con el objetivo de poner en evidencia el comportamiento crítico del sistema y determinar el exponente -β. Encontramos una diferencia significativa en la magnitud de -β, el que disminuye en las señales del grupo de pacientes parkinsonianos. Dado que en otros sistemas fisiológicos este aplanamiento del espectro $1/f$ se asocia a un aumento de entropía [7], surge la hipótesis de un aumento de entropía de las señales acelerométricas en enfermedad Parkinson. Para el cálculo de entropía seleccionamos el método de entropía de permutación, dado que presenta las ventajas de ser robusto ante señales cortas y variaciones en el nivel de ruido. Este método sigue una lógica simbólica, discretizando la señal en valores arbitrarios predefinidos como niveles, lo que se conoce como *coarse-graining*. De esta manera todas las señales quedan discretizadas en la misma cantidad de niveles o símbolos. El objetivo es encontrar patrones repetitivos dentro de la señal, definiendo patrón como conjunto de símbolos de largo o dimensión *m*. Para cada una de las señales se calcula la probabilidad de los patrones de dimensión *m* presentes y se calcula la entropía de permutación como: $H_p = -\sum Pd \log(Pd)$, donde H_p es entropía de permutación, y P_d la probabilidad de aparición de cada patrón. Al realizar la comparación estadística entre grupos poblacionales se observó un aumento de entropía en las señales de pacientes con enfermedad de Parkinson. Dado que las propiedades no-lineales de los sistemas dinámicos están relacionadas entre sí y también con el nivel de caos de los sistemas complejos, es esperable predecir correctamente las variaciones de una medida no-lineal a partir de otras [8,9]. El aumento de entropía en las señales acelerométricas en enfermedad de Parkinson coincide con lo esperado, lo que sumado al aplanamiento del espectro de potencias en estos pacientes contribuye a la hipótesis de que el sistema integrado neuromotor se encuentra en estado crítico. El nivel de entropía se transmite de los ganglios basales al sistema motor, por lo que se manifiesta como un emergente en señales de acelerometría de este sistema. Estos resultados sugieren un uso clínico de la entropía de permutación a partir de señales de acelerometría obtenidas con un dispositivo *wearable* como método diagnóstico cuantitativo en enfermedad de Parkinson.

Referencias:

[1] O. Darbin, Brain Res, (2006).
[2] J. K. H. Tang, E. Moro, N. Mahant *et al.*, J. of Neurophysiology, (2007).
[3] J. M. Beggs and D. Plenz, J. Neurosci, (2003).
[4] Bak, P., Tang, C., and Wiesenfeld, K., Phys. Rev. Lett. **59**, 381 (1987).
[5] D. S. Andres, D. Cerquetti, and M. Merello, J. of Neural Eng. **12**, 026004 (2015).
[6] G. Bianchi *et al.*, Revista Argentina de Bioingeniería, **24** (2020).

[7] M. Costa *et al.*, Phys. rev. lett. **12**, 026004 (2002).
[8] J.P. Eckmann and D. Ruelle, *The theory of chaotic attractors*, Springer, New York, (1985).
[9] L.S. Young, Phys. A, (1984).

Dinámica peatonal con presencia de Grupos Sociales

• Eric Rozan,[1] Guillermo Frank,[2] Ignacio Sticco,[1] Fernando Cornes,[1] Claudio Dorso[1,3]

[1] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Cuidad Universitaria, Buenos Aires 1428, Argentina*
[2] *Unidad de Investigación y Desarrollo de las Ingenierías, Universidad Tecnológica Nacional Facultad Regional Buenos Aires, Av. Medrano 95, 79 Buenos Aires, Argentina*
[3] *Instituto de Física de Buenos Aires, Pabellón 1, Ciudad Universitaria, 128 Buenos Aires, Argentina.*

El problema de la dinámica de multitudes ha atraído la atención de investigadores en diversas áreas. Uno de los modelos más empleados para describirla es el Modelo de Fuerza Social (SFM), en el cual el movimiento de cada individuo se debe a una combinación de fuerzas socio-psicológicas y físicas [1]. Uno de los observables más relevantes en esta área es el "diagrama fundamental", que relaciona el flujo de individuos con la densidad (peatones por metro cuadrado). Éste se divide en dos regímenes esenciales: el de libre circulación en el que el flujo aumenta con la densidad, y el congestionado en el que el flujo decrece o es aproximadamente constante [2]. En esta investigación analizamos el comportamiento del diagrama fundamental ante la presencia de grupos sociales. Para ello, incluimos lazos afectivos entre individuos de un mismo grupo en el SFM, de manera similar a la realizada en la Ref[3], y contrastamos la intensidad de los lazos afectivos con los datos experimentales publicados en la Ref [4]. Observamos que la presencia de grupos sociales altera el flujo habitual de peatones que transitan por un pasillo recto. Concluimos que el régimen de libre circulación alcanza mayores flujos. Sin embargo, una vez congestionado el pasillo la presencia de grupos sociales dificulta el tránsito de las personas, especialmente si los grupos incluyen muchos individuos.

Palabras clave: Interacciones entre Grupos Sociales / Física Computacional / Diagrama Fundamental de la Dinámica Peatonal

Referencias:

[1] D. Helbing, I. Farkas and T. Vicsek. *Simulating dynamical features of escape panic.* Nature **407**, 487 (2000).
[2] D. Helbing, A. Johansson and H. Z. Al-Abideen. *Dynamics of crowd disasters: An empirical study.* Phys. Rev. E **75**, 046109 (2007).
[3] G. A. Frank and C. O. Dorso. *Panic evacuation of single pedestrians and couples.* Int. J. Mod. Phys. C **27**, 1 (2016).
[4] Z. Yucel, F. Zanlungo, C. Feliciani, A. Gregorj and T. Kanda. *Identification of social relation within pedestrian dyads.* PLoSONE **14**, e0223656 (2019).

Calibración y aplicación del modelo de fuerza social: vestíbulos para mejorar las evacuaciones de emergencia

• Ignacio Mariano Sticco,[1] Guillermo Alberto Frank,[2] Claudio Oscar Dorso[1,3]

[1] *Departamento de Fisica, FCEyN, UBA*
[2] *Unidad de Investigación y Desarrollo de las Ingenierías, Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Buenos Aires*
[3] *Depto. Física, FCEyN (UBA) - IFIBA - CONICET*

En los últimos años, la dinámica de multitudes ha llamado la atención de investigadores en diversas áreas. Se han realizado numerosos estudios teóricos, experimentales y empíricos de fenómenos tales como evacuaciones de emergencia, peregrinaciones masivas, avalanchas humanas o eventos multitudinarios catastróficos. En esta investigación el foco está puesto en las evacuaciones de emergencia. Estudiamos este fenómeno mediante simulaciones computacionales basadas en el modelo de fuerza social de Helbing. La investigación se divide en dos partes. En la primera parte calibramos los parámetros del modelo usando datos empíricos extraídos a partir de una situación de alta ansiedad (semejante a una evacuación de emergencia). En la segunda parte aplicamos el modelo calibrado para explorar cambios arquitectónicos que mejoren el flujo de evacuación. Concretamente, estudiamos la incorporación de paneles delante de la puerta de salida de un recinto. Se trata de un "vestíbulo" capaz de regular la densidad de personas en tránsito de salida (y consecuentemente los bloqueos). Hicimos un análisis sistemático de las características del vestíbulo variando la fricción de las paredes, el tamaño del vestíbulo y la cantidad de entradas al mismo. Concluimos que es posible aumentar significativamente el flujo de evacuación si el vestíbulo tiene las características apropiadas.

Descripción entrópica en sistemas complejos ordenados jerárquicamente

• Jorge Revelli,[1,2] Marcos Gaudiano[2,3]

[1] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*
[2] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*
[3] *Centro de Investigación y Estudios de Matemática de Córdoba, CONICET - UNC*

La complejidad en el contexto de los sistemas interdisciplinarios ha dado lugar a un buen número de fenòmenos, muchos de ellos aùn buscan ser explicados. A pesar de la ubiquidad de las estructuras jeràrquicas encontradas en varios de estos sistemas, aùn se impone suponer condiciones iniciales aleatorias para analizar diversos modelos complejos, en particular a los referidos a modelos de sociofìsica. En el presente trabajo estudiamos dos dinámicas sociales totalmente distintas pero ambas caracterizadas por exhibir condiciones iniciales con una estructura N- dimensional, autosimilar y jeràrquica. Por un lado, observamos la evoluciòn de un modelo de formación de opinión (modelo de Sznajd). Por otro lado, analizamos el proceso de segregación de minorías (modelo de Schelling). Concretamente, estudiamos las evoluciones de dichos sistemas definiendo una entropìa generalizada, que resulta una función universal de la dimensiòn fractal de las configuraciones iniciales,
Por medio de simulaciones numéricas, la dependencia de las distribuciones de probabilidad en las estructuras iniciales es cuantificada en términos de dicha entropía. Varios regímenes entrópicos han sido detectados. El posible conjunto de respuesta de los sistemas se maximiza dentro de una zona de impredictibilidad.
La debilidad en las condiciones estructurales iniciales podría estar asociada, por un lado, a un favorecimiento en la emergencia de un nuevo patrón y por otro a un estado en el que se observan ciclos recurrentes de paz/segregaciòn.

Representación de series temporales dinámicas en Redes Neuronales Recurrentes

• Gonzalo Uribarri,[1] Gabriel B. Mindlin[1]

[1] *Instituto de Física de Buenos Aires, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales CONICET- Universidad de Buenos Aires*

Un problema central en ciencia e ingeniería es la caracterización y predicción de series temporales. En las últimas décadas, distintos algoritmos de aprendizaje automático han demostrado ser sumamente exitosos en este área utilizando un enfoque puramente basado en datos, es decir sin tener información sobre la naturaleza del proceso por el cual la serie temporal es generada [1,2].
Para muchas tareas secuenciales, las las redes neuronales recurrentes (RNN) son en la actualidad el tipo de algoritmo que presenta un mejor desempeño [3,4].
En la charla presentaré un trabajo en el cual entrenamos Redes Recurrentes (Long Short Term Memory) en una tarea de predicción de una serie de tiempo caótica [5]. Mostramos que, bajo ciertas condiciones, las redes entradas aprenden a generar un embedding de los datos en su estado interno que es topológicamente equivalente al atractor del sistema a partir del cual la serie fue generada. Es decir que el estado interno de las redes se puede pensar como una reconstrucción del espacio de fases original del sistema.

Referencias:

[1] Uribarri, G., Mindlin, G. B. *The structure of reconstructed flows in latent spaces*. Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science, **30**, 093109 (2020).
[2] LeCun, Y., Bengio, Y., Hinton, G. *Deep learning*. Nature **521**, 436 (2015).
[3] Lim, B., Zohren, S. *Time series forecasting with deep learning: A survey*. arXiv preprint (2020).
[4] Gamboa, J. C. B. *Deep learning for time-series analysis*. arXiv preprint (2017).
[5] Uribarri, G., Mindlin, G. B. *Dynamical time series embeddings in Recurrent Neural Networks*. En proceso de referato (2021).

Informacion contenida en las series de datos de la pandemia de COVID-19

• Andres Mauricio Kowalski,[1] Victoria Vampa,[2] Federico Holik,[1] Mariela Portesi,[1] Marcelo Losada[3]

[1] *Instituto de Fisica La Plata, CONICET-UNLP, La Plata*
[2] *Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata*
[3] *Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación, FAMAF-UNC, Argentina*

Desde la aparición de los primeros casos de infecciones por SARS-CoV2 en Wuhan (China) y su consiguiente propagación a nivel global, la pandemia de COVID-19 ha afectado nuestro mundo en multiples aspectos. A partir de los datos, muchos tratamientos matemáticos han intentado contribuir a su caracterización. Resulta fundamental para dicho propósito, conocer cuál es la información disponible. Hemos investigado la información contenida en las series de datos correspondiente a infectados y a fallecidos por país, usando cuantificadores de información como la entropía de Shannon y la complejidad estadística que han mostrado su potencial en distintas aplicaciones fuera del ámbito de la Fisica. Nuestros resultados muestran ser compatibles con un proceso altamente aleatorio.

Comparación de estrategias para vacunación COVID-19: con un modelo geo-estocástico

• Cecilia Ileana Ventura,[1,2,3] Nadia L. Barreiro,[4] Tzipe Govezenski,[5] Matías Núñez,[3,6,7] Pablo G. Bolcatto,[3,4,8,9] Rafael A. Barrio[10]

[1] *Gerencia de Física, Centro Atómico Bariloche, CNEA*
[2] *Universidad Nacional de Río Negro*
[3] *Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas*
[4] *Instituto de Investigaciones Científicas y Técnicas para la Defensa*
[5] *Inst. de Investigaciones Biomédicas, UNAM, México*
[6] *INIBIOMA, Univ. Nac. del Comahue, Bariloche*
[7] *Departamento Materiales Nucleares, Centro Atómico Bariloche, CNEA*
[8] *Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Argentina*
[9] *Instituto de Matemática Aplicada del Litoral*
[10] *Instituto de Física- UNAM , México.*

El control de la pandemia COVID-19 sigue presentando múltiples desafíos. Son esenciales las intervenciones de las autoridades para reducir infecciones, especialmente a través de restricciones de movilidad y de la vacunación, que se da en un contexto de escasez global de vacunas.
Con un modelo geo-estocástico que considera características biológicas del virus, así como la movilidad y la comunicación entre individuos de vecindarios reales, describimos la propagación de la pandemia en un país y comparamos los efectos de distintas estrategias de vacunación. En particular, mostramos nuestros resultados para Argentina, México y España.
Concretamente, aquí extendemos el modelo estocástico SEIRS para la propagación geográfica de la pandemia COVID-19 [1], agregando un compartimiento para individuos vacunados, quienes durante el período de inmunidad de la vacuna son removidos del compartimiento de individuos susceptibles. Los parámetros de movilidad del modelo se ajustaron para describir la evolución de la pandemia resp. en Argentina, México y España, simulando las restricciones debidas a cuarentenas, y otros comportamientos sociales, como se hizo más recientemente [2].
Aquí analizamos el efecto de diversas estrategias de vacunación por etapas, como las propuestas por la OMS, y los gobiernos [3]. Demostramos que, en un contexto de escasez de vacunas, es más efectivo priorizar la vacunación en las areas más densamente pobladas que distribuir homogéneamente las vacunas. Mostramos que el impacto de la vacunación es mayor cuando la movilidad es más baja (sea por restricciones debidas a cuarentenas, o bien en países con menor comunicación entre ciudades). Encontramos que como la enfermedad reaparece, en olas, las campañas de vacunación deberían ser repetidas teniendo en cuenta el período de inmunidad de los individuos vacunados, y de los recuperados.

Referencias:

[1] R.A. Barrio, K.K. Kaski, G.G.Haraldsson, T.Aspelund, and T.Govezensky, Phys. A **582**, 126274 (2021).
[2] N.L. Barreiro, T. Govezensky, P.G. Bolcatto, and R.A. Barrio, Sci. Rep. **11**, 10024 (2021).
[3] N.L. Barreiro, C.I. Ventura, T. Govezensky, M. Núñez, P.G. Bolcatto, and R.A. Barrio, arXiv

Estrategias de mitigación frente a la propagación del COVID-19

• Fernando Cornes,[1] Guillermo Frank,[2] Claudio Dorso[1,3]

[1] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*
[2] *Unidad de Investigación y Desarrollo de las Ingenierías, UTN-FR Buenos Aires.*
[3] *Instituto de Física de Buenos Aires, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales CONICET- Universidad de Buenos Aires*

Se propone un modelo epidemiológico, el cual incluye patrones de movilidad de los individuos [1]. Se asume que las personas se desplazan dentro de una ciudad constituida por 120x120 manzanas con 300 personas en cada una de ellas. El patrón de movilidad se representa mediante una red compleja en donde los nodos representan las manzanas, mientras que los links representan el desplazamiento de los individuos entre las mismas [2-4]. Se implementan tres estrategias de confinamiento con el fin de mitigar la propagación del COVID-19: 1) cuarentena global, 2) cuarentena con reducción parcial de la movilidad y 3) cuarentena localizada. En el primer caso se observó que una política de aislamiento global previene la propagación masiva del virus por la ciudad. En el segundo caso, una reducción parcial de la movilidad puede provocar un contagio masivo si no es acompañada por medidas sanitarias complementarias (ej. uso de barbijo, distanciamiento social, entre otros). Finalmente, la implementación de cuarentenas localizas en regiones donde la infección es elevada permite reducir la propagación del virus y, a su vez, evita tener que aislar (y perjudicar) manzanas libre de virus. Por último, cabe destacar que si bien los tres tipos de cuarentena logran mitigar la propagación del COVID-19, éstas provocan un costo económico sobre la ciudad. Por lo tanto, se propuso una función de costo con el fin de comparar las tres estrategias de aislamiento. El mejor escenario se observó en el caso de la cuarentena localizada. Resultados similares se observaron en el caso de una cuarentena global de corta duración complementada por estrictas medidas sanitarias.

Referencias:

[1] F. E. Cornes, G. A. Frank, and C. O. Dorso, *COVID-19 spreading under containment actions* arXiv (2021).
[2] D. H. Barmak, C. O. Dorso, M. Otero, and H. G. Solari, *Dengue epidemics and human mobility* Phys. Rev. E **84**, 011901 (2011).
[3] D. Barmak, C. Dorso, and M. Otero, *Modelling dengue epidemic spreading with human mobility* Phys. A **447**, 129 (2016).
[4] A. D. Medus, and C. O. Dorso, *Diseases spreading through individual based models with realistic mobility patterns* arXiv (2011).
[5] F. E. Cornes, G. A. Frank, and C. O. Dorso, *Cyclical lock-down and the economic activity along the pandemic of covid-19* arXiv (2020).

Automatic data imputation in time series processing using neural networks for industry and medical datasets

• Juan Ignacio Porta,[1,2] Martin Ariel Dominguez,[2] Francisco Antonio Tamarit[1,2]

[1] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*
[2] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*

Time series classification and regression techniques help solve problems in many knowledge areas, including medicine, electronics, industry, and even music. When we apply them to real-life issues, a common obstacle is the lack of data in intervals within a time series. Usually, to solve it, the missing data is populated with information highly dependent on available datasets, which requires prior analysis. This paper addresses the problem in a novel way, automatically filling the missing data using a mixture of techniques and letting the prediction model decide which filling is better. We tested our approach for classification in industrial and medical datasets and for regression, we used a dataset cointaining COVID-19 information.
Our results are very competitive, and our approach improves the state-of-the-art models. We obtain better performance in all the experiments for the selected quality measures. Most importantly, the improvement is more statistically significant when the amount of missing data is higher.

De la evolución al plegado de proteínas repetitivas

• Ezequiel Galpern,[1,2] Diego Ferreiro[1,2]

[1] *Instituto de Química Biológica de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales*
[2] *Departamento de Química Biológica, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires*

Las proteínas repetidas están formadas por copias en tándem de tramos de aminoácidos similares que se pliegan en arquitecturas alargadas. Debido a su simetría estructural, son un sistema único para modelar cómo las restricciones evolutivas a nivel de secuencia pueden afectar la estructura terciaria, el plegado y la función protéica. En este trabajo partimos de un set de datos de más de 150000 secuencias de la familia Ankirina, la repetitiva más numerosa. Combinamos un modelo evolutivo de Potts con un modelo mecánistico explícito de duplicaciones y eliminaciones de repeticiones completas para calcular los parámetros evolutivos del sistema. Utilizamos la energía obtenida para calcular los parámetros de un modelo de plegado de juguete para proteínas repetidas. Se trata de un modelo de ising 1D de grano grueso donde cada spin corresponde a un fragmento de secuencia de proteína que puede estar plegado o desplegado. Implementamos simulaciones de Monte Carlo de este modelo utilizando solo información de las secuencias, obteniendo curvas de despliegado térmico que son compatibles con los resultados experimentales reportados. Realizamos un análisis a gran escala del set de datos, caracterizando la estabilidad, la presencia de intermediarios, las barreras de energía libre y la cooperatividad del plegado. Finalmente, logramos predecir características fundamentales del plegado vinculadas a la función protéica, allanando el camino para guiar el diseño de proteínas utilizando un modelo evolutivo.

Optimización de parámetros de difusión en red para la priorización de drogas

• Bruno Kaufman,[1,2] Ariel Chernomoretz[1,3]

[1] *Fundación Instituto Leloir*
[2] *Instituto de Investigaciones Bioquímicas de Buenos Aires*
[3] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*

El aprendizaje automático ha sido utilizado ya por muchos años para descubrir nuevos propósitos para drogas ya existentes. El enfoque de este método es proponer qué drogas podrían tener una interacción desconocida con una dada proteína (target). Utilizando redes de similaridad entre drogas, gracias al aprendizaje semisupervisado se puede extender el conocimiento de drogas cuyas interacciones con el target ya con conocidas (denominadas drogas "semilla") para obtener estas drogas nuevas.
En este trabajo, se propone difundir sobre una red que combina distintas medidas de similaridad química entre drogas, además de una medida de similaridad basada en las interacciones en común que las drogas tienen con proteínas target. La pregunta que se responde es cómo obtener el balance correcto entre las distintas redes para formar la red híbrida cuya información contribuída sea óptima para el propósito de la priorización. Además de optimizar estos parámetros, se busca obtener la difusión en red más conveniente y el punto de corte más correcto para recomendar un conjunto de drogas.
En distintas componentes de la red se obtiene distinto rendimiento. Exploramos esta variabilidad en torno a la estructura en red de estas componentes, además de la información que se tiene disponible para entrenar el algoritmo en cada caso.

Coordenadas doblemente nulas en espaciotiempo de Kerr

• Marcos Ariel Argañaraz,[1] Osvaldo M. Moreschi[1,2]

[1] *Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación, Universidad Nacional de Córdoba*
[2] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*

Se presenta la definición de un par de coordenadas nulas que están naturalmente adaptadas a los horizontes y al infinito nulo futuro del espaciotiempo de Kerr, y que están generadas por las secciones centro de masa en el infinito nulo. Ellas son una familia suave de hipersuperficies nulas que dan lugar a una foliación del espaciotiempo de Kerr en un sentido saliente y entrante, respectivamente, y que tiene una extensión regular a través de los horizontes. Debido a la peculiar geometría de Kerr, la construcción involucra una ecuación diferencial no lineal para una función escalar relacionada a la constante de Carter, cuya solución no puede ser expresada en términos de funciones analíticas simples. Presentamos la solución numérica para este escalar, para una determinada elección de parámetros. En esta estructura, aparecen naturalmente una familia doble-dimensional de superficies espaciales redondeadas S_{r_s} que está parametrizadas por r_s, que son la intersección de ambas coordenadas nulas, donde r_s puede interpretarse como la extensión a Kerr de la coordenada tortuga. Las superficies S_{r_s} son axialmente simétricas, pero tienen una dependencia (r, θ) en coordenadas de Boyer-Lindquist. Ellas también pueden ser caracterizadas de manera completamente geométrica mediante sus curvaturas escalares Gaussiana y extrínseca, que fuimos capaces de calcular usando el formalismo de Geroch-Held-Penrose. Se compara la nueva definición con otros intentos previos en la literatura, y mostramos que todas ellas tienen un comportamiento divergente en el eje de simetría. Por lo tanto, nuestra construcción presenta el primer sistema coordenado doblemente nulo que hace posible cálculos alrededor de todo el espaciotiempo de Kerr.

Referencias:

[1] F. Pretorius and W. Israel, Class. Quant. Grav. **15**, 2289 (1998). DOI, arXiv
[2] S. A. Hayward, Phys. Rev. Lett. **92**, 191101 (2004). DOI, arXiv
[3] M. A. Argañaraz and O. M. Moreschi, Phys. Rev. D **104**, no.2, 024049 (2021). DOI

Cohete superradiante de agujero negro

• Lucas Acito,[1] Nicolás Grandi,[2] Pablo Pisani[2]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas - Universidad Nacional de La Plata*
[2] *Instituto de Física La Plata, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP - CONICET*

El fenómeno de superradiancia en agujeros negros consiste en la absorción de información en forma de paquetes de onda, y al mismo tiempo la emisión de energía en forma de ondas planas monocromáticas por parte del agujero negro. Se investigó este fenómeno para campos escalares con carga cuando se coloca un espejo semiesférico concéntrico a un agujero negro estático y con carga. Se considera el sistema agujero negro-espejo inmerso en un baño térmico a una temperatura distinta a la del agujero negro. En primera instancia, se resolvió la ecuación de Klein-Gordon mínimamente acoplada para un campo escalar cargado en espacio curvo, dado por la métrica de Reissner-Nordström. Luego, se cuantizó el sistema teniendo en cuenta que el baño termico sigue la estadística de Bose-Einstein y se calculó el empuje total producido cuando los modos escalares emitidos por un agujero negro superradiante son reflejados por el espejo semiesférico. El empuje obtenido nos permite pensar la configuración agujero negro-espejo como un "cohete" superradiante.

Fluctuaciones cuánticas del vacío en presencia de medios no-homogéneos

Sebastián Alberto Franchino Viñas,[1,2] • Matías Mantiñan,[3,4] Francisco Diego Mazzitelli[3,4]

[1] *Institut für Theoretische Physik, Universität Heidelberg D-6912 Heidelberg, Germany.*
[2] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata*
[3] *Centro Atomico Bariloche - Comisión Nacional de Energía Atómica*
[4] *Instituto Balseiro - Universidad Nacional de Cuyo*

En este trabajo se analizó el efecto Casimir en presencia de medios no homogéneos, con la mirada puesta en el estudio de las divergencias que la teoría presenta en medios discontinuos y en la validez del llamado principio de trabajos virtuales. Se estudió un campo escalar con masa variable, como modelo simplificado para el estudio de las fluctuaciones del vacío del campo electromagnético en presencia de medios no homogéneos, con la masa jugando el papel de la permeabilidad/permitividad. Utilizando técnicas de la teoría cuántica de campos en espacios curvos, se obtuvieron las divergencias esperadas para los valores medios $\langle \phi^2 \rangle$ y $\langle T_{\mu\nu} \rangle$ en la teoría escalar. Se calcularon estos valores medios perturbativamente en potencias de la masa. Se obtuvieron expresiones formales válidas a todo orden y luego se estudiaron en detalle el primer y segundo orden del desarrollo. Se aislaron las divergencias obtenidas por regularización dimensional y se evaluaron las partes finitas, obteniéndose las fuerzas de Casimir en distintas configuraciones. Se demostró la validez del principio de trabajos virtuales para una configuración general y a todo orden perturbativo para esta teoría. No se encontraron las anomalías en la presión que eventualmente aparecen cuando se utilizan métodos de regularización no covariantes. Para completar el analisis se compararon las divergencias superficiales con las que se obtienen haciendo un desarrollo WKB.

Campos Magnéticos Cosmológicos

• Alejandra Kandus[1]

[1] *Laboratorio de Astrofísica Teórica e Observacional - Departamento de Ciencias Exatas e Tecnológicas - Universidade Estadual de Santa Cruz - Brasil*

El Universo está permeado por campos magnéticos. Desde los planetas, pasando por estrellas y galaxias, hasta los grandes cúmulos de galaxias, la presencia de esos campos es absoluta. En esta charla describiremos brevemente las observaciones de B's en diversos sistemas, sus características y magnitudes y discutiremos por qué el escenario más probable para su origen es el Universo primordial, en especial las transiciones de fase Electrodébil y QCD, y procesos durante Inflación y Recalentamiento del Universo.

Gravedad cuántica en espacios de Sitter y Teoría M

• Gonzalo Torroba,[1] Eva Silverstein,[2] Bruno De Lucca[2]

[1] *Centro Atómico Bariloche, CONICET - Instituto Balseiro, UNCuyo*
[2] *Stanford University*

En esta charla presentaremos un mecanismo para obtener la expansión acelerada del universo utilizando compactificaciones de teoría M en variedades de curvatura negativa, e ingredientes mínimos. Mostraremos que teoría M en una variedad hiperbólica junto con energía de Casimir y flujos dan lugar a una estabilización del volumen interno con energía potencial positiva. Estos resultados permiten generalizar la dualidad AdS/CFT con M2 branas a espacios de Sitter, e introducen nuevas conecciones entre matemática y física de compactificaciones en teoría de cuerdas/teoría M.

Towards improved constraints on modified gravity using Einstein rings

• Martin Makler,[1,2] Renan Alves de Oliveira,[3] Gabriel Crisnejo[4]

[1] *Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro, Brazil*
[2] *International Center for Advanced Studies- Escuela de Ciencia y Técnica- Universidad de San Martín*
[3] *Universidade Federal do Espírito Santo*
[4] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*

Galaxy-scale strong lensing systems are key for testing modifications of general relativity at the few kpc scales. In particular, combining the kinematics of the central galaxy with the lens modeling allows one to set constraints on the so-called slip parameter η, which is the ratio of the two scalar potentials for general metric theories. The current constraints on η are either based on a single system at low redshift or on a heterogeneous sample of lenses, which have only a coarse measurement of the velocity dispersion and are subject to strong modeling assumptions. We are carrying out a systematic study to improve the statistical measurements of η with Einstein rings in a number of ways by: i) providing a new sample of systems, with a more homogeneous selection and analysis; ii) performing a more self-consistent analysis, using the mass and luminosity profiles derived from the data for each system; iii) addressing some of the systematics of the previous analyses, including improved models for the velocity anisotropy; iv) gathering higher quality data for selected systems, in particular, spatially resolved spectroscopy. In this talk we shall report on the recent progress on points i) through iii) above. In particular, we will present a new sample of Einstein rings obtained using archival images from wide-field surveys. This sample is used in combination with existing samples to yield limits on η, studying its dependence with lens mass and redshift. We find that the data is consistent with the prediction from General Relativity, $\eta = 1$. We show that there is a degeneracy between the estimates of η and the parameters of the velocity anisotropy. However, this more realistic modeling of the kinematics still enables one to derive meaningful constraints on η.

Acorralando neutrinos y materia oscura con una misma tecnología

• Darío Rodrigues,[1] .et al[1,2,3,4,5]

[1] *Instituto de Física de Buenos Aires, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales CONICET- Universidad de Buenos Aires*
[2] *Centro Atómico Constituyentes, Comisión Nacional de Energía Atómica*
[3] *Centro Atómico Ezeiza - Comisión Nacional de Energía Atómica*
[4] *Centro Atomico Bariloche - Comisión Nacional de Energía Atómica*
[5] *Fermi National Accelerador Laboratory, DOE, EEUU*

Si bien los neutrinos se detectaron por primera vez hace 65 años, y la materia oscura aún no ha sido observada en forma directa, sus bajísimas probabilidades de interacción plantean un desafío común para la física experimental. En esta charla discutiremos como una misma tecnología, el Skipper-CCD, permite alcanzar los mejores límites de exclusión a la sección eficaz de interacción de materia oscura liviana y tiene el potencial para establecer las cotas de exclusión más competitivas al acoplamiento de diferentes modelos de física de neutrinos mas allá del modelo estándar.

Búsquedas de partículas supersimétricas vía producción fuerte con el detector ATLAS

• Joaquin Hoya,[1] Colaboración ATLAS[2]

[1] *Instituto de Fisica La Plata, CONICET-UNLP, La Plata*
[2] *CERN*

La supersimetría (SUSY) es una teoría que proporciona soluciones elegantes a varios problemas del Modelo Estándar, y la búsqueda de partículas predichas por SUSY es una parte importante del programa de física del LHC. Las compañeras supersimétricas de gluones y quarks podrían ser producidas en el LHC, considerando argumentos de naturalidad en la teoría a escala débil. En esta charla se presentarán los últimos resultados de las búsquedas llevadas a cabo por el experimento ATLAS con producción de gluinos y squarks, con diversos modos de decaimiento, priorizando aquellos con conservación de paridad R, donde la partícula SUSY más liviana y estable es una buena candidata a materia oscura.

El experimento DUNE: la próxima generación de detectores de neutrinos

• Sabrina Sacerdoti[1]

[1] *Laboratoire Astroparticule et Cosmologie - CNRS*

Esta presentación tiene como objetivo realizar una descripción general del experimento DUNE (Deep Underground Neutrino Experiment), uno de los grandes detectores que forman parte de la próxima generación de experimentos de neutrinos. Estos nuevos experimentos están diseñados para realizar las mediciones de alta precisión necesarias para comprender mejor la naturaleza de los neutrinos. Principalmente, el ordenamiento de sus masas y la existencia o no de violación de CP.
El complejo de aceleradores en el laboratorio Fermilab, en Chicago (USA) genera el haz de néutrinos más potente hasta ahora logrado, de 1.2MW. Ubicados cerca del target del haz, un conjunto de detectores (Near Detector, ND) caracteriza el flujo de neutrinos, obteniendo así una referencia para las mediciones realizadas en el detector lejano (FD, Far Detector). Este último es un gran detector de argón líquido (LAr) ubicado a 1300km de distancia, en SURF (Sanford Underground Research Facility), en South Dakota, a 1.5 km de profundidad. Consiste en cuatro grandes módulos, de 17kton the LAr cada uno; al menos los dos primeros están basados en la tecnología de LArTPC (Liquid Argon Time Projection Chamber). Esta tecnología fue desarrollada durante los últimos 40 años, pero esta es la primera vez que se utiliza en detectores con volúmentes de miles de toneladas. Por encontrarse a una profundidad considerable y gracias a su enorme volúmen, el FD también es ideal para realizar mediciones de neutrinos solares y detectar neutrinos provenientes de una supernova, si alguna ocurriera durante su tiempo de operación.
Actualmente, mientras progresa la preparación de las instalaciones en SURF, Fermilab realiza la actualización necesaria de sus sistemas de aceleradores, y en CERN (Ginebra) se prueban los prototipos de los detectores a instalar en los primeros dos módulos del FD. Se trata de un gran esfuerzo internacional, que ya involucra alrededor de 1300 colaboradores de 30 países.

Física de neutrinos con el experimento CONNIE

• Carla Bonifazi,[1] para la colaboración CONNIE[1]

[1] *International Center for Advanced Studies- Escuela de Ciencia y Técnica- Universidad de San Martín*

El experimento CONNIE (Coherent Neutrino-Nucleus Interaction Experiment) utiliza dispositivos de carga acoplada (CCDs) con el objetivo de detectar la dispersión elástica coherente de los antineutrinos de reactor con núcleos de silicio y sondear física más allá del Modelo Estándar. CONNIE se encuentra a una distancia de 30 m del núcleo del reactor nuclear Angra-2 de 3,8 GW en Río de Janeiro, Brasil. El experimento tomó datos de 2016 a 2020 con un nivel de ruido electrónico menor a 2 e- de RMS y una masa activa de 50 g. El análisis de los datos de 2016-2018 permitió establecer un límite superior con el 95% de nivel de confianza de la tasa de dispersión coherente. Este límite se utilizó para imponer restricciones estrictas a extensiones simplificadas del Modelo Estándar con mediadores débiles. Durante 2019-2020 el experimento tomó datos en modo "re-binning" de forma de mejorar la relación señal-ruido. Esto permitió aumentar la eficiencia a baja energía e bajar el umbral de detección a 50 eV. El próximo paso para el experimento es usar sensores de nueva tecnología conocidos como skipper CCD, que permiten bajar enormemente el ruido de lectura, disminuyendo aún más el umbral de detección. Recientemente, dos skipper-CCDs fueron instalados en el experimento y están tomando datos en forma continua. CONNIE fue el primer experimento de neutrinos de reactor con CCDs y ahora es el primero a operar con skipper-CCDs. En esta charla voy a mostrar el rendimiento del experimento y presentar los últimos resultados de CONNIE, así como también las primeras medidas con los skippers.

The First Latin American Strategy Forum for Research Infrastructure for High Energy, Cosmology and Astroparticle Physics

• Hernan Pablo Wahlberg,[1] Diana Lopez Nacir,[2] Federico Sanchez[3]

[1] *Instituto de Física de La Plata, Dpto. de Física, FCE - UNLP*
[2] *Depto. Física, FCEyN (UBA) - IFIBA - CONICET*
[3] *Instituto de Tecnologías en Detección y Astropartículas, CONICET-UNSAM-CNEA*

El proceso para el Primer Foro Latinoamericano de Estrategia para la Infraestructura de Investigación en Física de Altas Energías, Cosmología y Astropartículas (LASF4RI) concluyó en octubre de 2020. El Grupo Preparatorio redactó un artículo basado en unos 40 proyectos presentados por la comunidad. Este trabajo sirvió como base para el documento de estrategia que fue presentado a la IV Reunión Ministerial Iberoamericana de Ciencia y Tecnología que tuvo lugar el 27 de octubre de 2020 donde se reconoció en su Declaración. En esta presentación se resumen las distintas etapas del proceso, sus resultados, conclusiones y próximas actividades.

Mesa Redonda "Evaluaciones en ciencia con perspectiva de género: expectativa vs realidad"

Soledad Cutuli,[1] • Cynthia Jeppesen,[2] • Laura Steren[3]

[1] *Facultad de Filosofía y Letras, Universidad de Buenos Aires*
[2] *Gerenta de Evaluación y Planificación en CONICET*
[3] *Centro Atómico Constituyentes, Comisión Nacional de Energía Atómica*

En esta mesa discutiremos temas tales como: sesgos en procesos de evaluación y premiación, meritocracia, representación federal. Nuestra idea desde la subcomisión, es generar este debate, especialmente dentro de la comunidad de fisiques, y reflexionar colectivamente sobre la ciencia actual y a la que aspiramos.
Contaremos con la participación de Soledad Cutuli (Antropóloga, docente e investigadora, UBA), Cynthia Jeppesen (Gerenta de Evaluación y Planificación en CONICET) y Laura Steren (Física, docente e investigadora, CNEA – CONICET) como panelistas, y será moderada por Lucila Álvarez Zuzek, Luciana Bruno, Flavia Gómez Albarracín y Nara Guisoni en representación de la Subcomisión de Género.

Vacunas, las mejores herramientas para hacer "pensar" a nuestro Sistema Inmune

• María Carolina Amezcua[1]

[1] *Centro de Investigaciones en Bioquímica Clínica e Inmunología, Facultad de Ciencias Químicas, UNC*

Las vacunas han transformado los sistemas de salud a nivel mundial, particularmente cuando comenzaron a existir los calendarios de vacunación obligatorios y los mismos empezaron a ser coordinados por los estados nacionales. En países en donde hay una alta cobertura de vacunación, muchas de las enfermedades responsables de muertes en menores disminuyeron y algunas hasta desaparecieron. Se estima que los programas de vacunación salvan a nivel mundial entre 2 a 3 millones de vidas anuales. Durante la charla responderemos algunas preguntas como por ejemplo ¿Cómo funcionan las vacunas? ¿Cómo están compuestas? ¿Que sucede en nuestro cuerpo cuando se introduce una vacuna? ¿Cuales son los logros que ha logrado la vacunación a nivel mundial?

Variantes del SARS-CoV-2 y su evolución en Argentina

• Carolina Torres[1,2]

[1] *Instituto de Bacteriología y Virología Molecular. Facultad de Farmacia y Bioquímica, Universidad de Buenos Aires.*
[2] *Proyecto Argentino Interinstitucional de genómica de SARS-CoV-2 (Proyecto PAIS).*

Desde fines del 2020, la emergencia de variantes virales del SARS-CoV-2 cobró una particular importancia sanitaria. Desde el inicio de la pandemia de la COVID-19, la distribución de variantes en Argentina se ha visto impactada por la epidemiología de América del Sur, especialmente durante la segunda ola. En esta charla, presentaremos las principales características de las variantes del SARS-CoV-2 de importancia epidemiológica, con foco en la distribución y evolución de aquellas asociadas a la pandemia en nuestro país.

Vacunas anti COVID, logros y desafíos

• Jorge Geffner[1,2]

[1] *Investigador CONICET*
[2] *Vicedirector del INVIRS*

TBA

Estado de situación de la pandemia y avance de la campaña de vacunación en nuestro país

• Martín Barrionuevo[1]

[1] *Contador, Senador Provincial de Corrientes*

TBA

Simulando el impacto de la vacunación pediátrica en Argentina

• Germán Soldano[1,2]

[1] *Dr. en Ciencias Químicas, Investigador CONICET*
[2] *Docente en el Departamento de Química Teórica y Computacional de la Facultad de Ciencias Químicas, UNC.*

TBA

Modelo epidemiológico geo-estocástico aplicado a la pandemia: Estrategias de vacunación y el efecto de las nuevas variantes del SARS-CoV-2

• Nadia L. Barreiro N. L.,[1] T. Govezensky,[2] C. I. Ventura,[3] M. Nuñez,[4,5,6] P. G. Bolcatto,[1,7] R. A. Barrio[8]

[1] *Instituto de Investigaciones Científicas y Técnicas para la Defensa (CITEDEF), 1603, Buenos Aires, Argentina*
[2] *Instituto de Investigaciones Biomédicas, Universidad Nacional Autónoma de México, México 04510, México*
[3] *(CONICET) Centro Atómico Bariloche-CNEA, and Universidad Nacional de Río Negro, 8400-Bariloche, Argentina*
[4] *Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Buenos Aires, Argentina*
[5] *Departamento Materiales Nucleares, Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA), Bariloche, Argentina*
[6] *INIBIOMA, Universidad Nac. del Comahue, Bariloche, Argentina*
[7] *Instituto de Matemática Aplicada del Litoral (IMAL, CONICET/UNL), FHUC. Santa Fe, 3000, Argentina*
[8] *Instituto de Física. Apartado Postal 20-365, Universidad Nacional Autónoma de México, México 04510, México*

Al día de hoy, la expansión mundial de la COVID-19 ha producido cientos de millones de contagios. A medida que el virus se propaga, su genoma se replica produciendo errores que conducen a mutaciones. Si bien se han descubierto miles de ellas, solo algunas pocas, que modifican la proteína "spike", afectan la transmisibilidad de la enfermedad volviéndolas más infecciosas y resistentes a las vacunas. Estas variantes con relevancia clínica son denominadas variants of concern (VOC) por la organización mundial de la salud. En este contexto, resulta relevante el estudio de la dinámica de propagación del virus, debido a las nuevas cepas, en diferentes escenarios de vacunación. Para ello, en este trabajo, se elabora un modelo epidemiológico geo-estocástico basado en trabajos previos [1-3] que, integrando parámetros epidemiológicos, demográficos y sociales, permite estudiar la evolución de la pandemia en una región o un país. Este utiliza un mapa matemático de ecuaciones discretas demoradas en el tiempo basado en un sistema compartimental tipo SEIR modificado para incluir tanto las nuevas variantes como la vacunación. En esta charla se hará una breve reseña del funcionamiento del modelo, indicando sus beneficios y limitaciones, y se mostrarán resultados preliminares de la aplicación del modelo en áreas geográficas conocidas comparándolos con datos oficiales. Finalmente se comentará sobre la necesidad (o no) de nuevas dosis de la vacuna en el futuro.

Referencias:

[1] Barreiro N. L., Govezensky T. Bolcatto P.G., and Barrio R.A., *Detecting infected asymptomatic cases in a stochastic model for spread of Covid-19: the case of Argentina* Sci. Rep. **11**,10024 (2021). DOI

[2] Rafael A. Barrio, Kimmo K. Kaski, Gumundur G.Haraldsson, Thor Aspelund, and Tzipe Govezensky, *A model for social spreading of Covid-19: Cases of Mexico, Finland and Iceland* Phys. A **582**, 126274 (2021). DOI

[3] Barreiro, N. L, Ventura, C. I., Govezensky, T., Núñez, M., Bolcatto, P. G., and Barrio, R. A., *Strategies for COVID-19 vaccination under a shortage scenario: a geo-stochastic modelling approach* ,Medrxiv, (2021). DOI

Control (y descontrol) en el mundo cuántico

• Pablo M. Poggi[1]

[1] *University of New Mexico, Albuquerque, New Mexico, USA*

La actual revolución en tecnologías cuánticas está basada en aprovechar propiedades físicas como la coherencia y el entrelazamiento para diseñar dispositivos de cómputo que superen a sus contrapartes clásicas en ciertas tareas, como por ejemplo simular sistemas cuánticos de muchos cuerpos. Para alcanzar esta 'ventaja' cuántica, es necesario manipular de manera extremadamente precisa sistemas cuánticos, y a la vez protegerlos de influencias externas como la decoherencia. En esta charla voy a introducir conceptos básicos de información cuántica para luego describir distintas técnicas basadas en la teoría de control cuántico, que permiten manipular estos sistemas de manera precisa ya sea 'ganándole' a los efectos negativos del entorno o contrarrestándolos. Finalmente, ilustraré la relación entre estas herramientas de control y el potencial de los dispositivos cuánticos actuales.

Mi tesis doctoral: Estudio de Medio Difusivos con inclusiones de bajo Scattering, y cómo sigo ahora

• Pamela A. Pardini[1]

[1] *Instituto de Física Arroyo Seco (CIFICEN-CONICET), Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires*

Durante la charla contaré mi trabajo de tesis doctoral, donde estudié cómo es el transporte de luz en el infrarrojo cercano en medios difusivos, y de particular interés, el tejido mamario. El estudio fue realizado sobre fantomas, que son sistemas que emulan propiedades de los tejidos reales, con las características ópticas de las mamas (alto coeficiente de scattering y relativa baja absorción) con dos tipos de heterogeneidades localizadas que representan tumores, de alto scttering, y quistes, de bajo scattering, en dos arreglos experimentales que emplean luz infrarroja: transmitancia, una técnica de onda continua con cámara CCD como detectores, que permite una primera caracterización cualitativa del sistema; y en un sistema tomográfico, empleando láseres pulsados y detectores conectados a una placa de conteo de fotones.
Específicamente, se consiguió evaluar, en un entorno de laboratorio, un arreglo experimental para el estudio topográfico y tomográfico, con aplicación para el estudio diagnóstico de patologías mamarias, usando una fuente láser, de baja potencia, y detectores adecuados.
Resumiré los principales resultados y cómo ellos aportaron al proyecto en el que me desempeño actualmente: 'Mamógrafo Óptico', que nació en el grupo de investigación donde fue realizada la tesis, y que fue reconocido en dos oportunidades en concursos de ideas innovadoras. Actualmente, el desarrollo tecnológico es llevado adelante por la startup BIONIRS, que fundamos junto a los investigadores del grupo de Óptica Biomédica, que actualmente se encuentra incubada. Me desempeño como la CEO de esa empresa, y compartiré cómo fue cambiar de la academia a una EBT, y de qué se trata el desarrollo Mamógrafo Óptico.

Dinámica Unidimensional: simulación del movimiento amortiguado

• Ernesto Farias de la Torre,[1] Gastón Jacquier,[2] Jose Sanchez[1,3]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas Físicas y Naturales - Universidad Nacional de Córdoba*
[2] *Universidad Tecnológica Nacional - Facultad Regional Córdoba*
[3] *Facultad de Ciencias Exactas Físicas y Naturales -UNC*

Se desarrolla la simulación de un experimento de dinámica unidimensional referido al movimiento amortiguado bajo distintas condiciones de amortiguamiento: sobreamortiguado, subamortiguado y crítico. El experimento simulado supone dos partes: i) Simulación de un experimento de Stokes a fin de determinar el coeficiente de fricción, c. ii) Simulación del movimiento amortiguado para una determinada relación entre el coeficiente de fricción y el coeficiente crítico. Dada la dificultad experimental de lograr la variación adecuada del coeficiente de fricción a fin de obtener los distintos tipos de amortiguamiento se propone realizar, a tal fin, la variación del coeficiente crítico mediante la variación (aumento) de la masa, y así pasar del sobreamortiguado al subamortiguado mediando el crítico. La obtención de este último es un objetivo importante en este sentido. La generación de los datos para la simulación se realiza a partir de las respectivas funciones teóricas produciendo variaciones aleatorias mediante un generador de números al azar. Este proceso se cierra calculando la dispersión standard en función de la relación entre el coeficiente de fricción y el crítico y verificando que su mínimo se registra para la relación seleccionada entre ambos coeficientes. Finalmente, y para la realización del experimento en concreto, se procede a comparar los sistemas por rodamiento y por suspensión por aire como así también la utilización, como fluido viscoso del aceite o la glicerina.

Método de las imágenes aplicado a cargas dentro de geometrías cilíndricas conductoras con diferentes secciones

• Sebastian Tognana,[1,2,3] Walter Salgueiro,[1,2,3] Susana Montecinos[2,3,4]

[1] *Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires, Calle 526 entre 10 y 11, 1900 La Plata, Argentina*
[2] *Instituto de Física de Materiales Tandil. Facultad de Ciencias Exactas. Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires. Pinto 399 - 7000 Tandil*
[3] *CIFICEN (UNCPBA-CICPBA-CONICET), Pinto 399, 7000 Tandil, Argentina*
[4] *CONICET*

El método de las imágenes es un método de resolución del potencial electrostático con condiciones de contorno dadas. Es un método simple que se basa en colocar cargas puntuales o distribuciones continuas de carga, denominadas cargas imagen, de manera de satisfacer las condiciones de contorno que especifica el problema. Este permite determinar la solución en algunas geometrías simples. Generalmente es presentado en cursos de electromagnetismo como un método de resolución de problemas de electrostática. Sin embargo, es necesario utilizar razonamientos geométricos para colocar las cargas imagen de manera de cumplir las condiciones de contorno especificadas. En este trabajo se presentan problemas seleccionados de electrostática resueltos mediante imágenes. En particular se resuelven los casos de una carga dentro de geometrías cilíndricas conductoras a potencial de tierra con secciones triángulo equilátero, triángulo rectángulo y cuarto de circunferencia. En los dos primeros casos resulta necesaria una cantidad infinita de cargas imagen para determinar el potencial, colocadas a distancias cada vez más alejadas del tubo conductor. En el caso de la sección de cuarto de circunferencia resulta necesario un número finito de cargas. Se analizan los problemas en función de las condiciones de contorno establecidas y determinación de cargas imágenes. La solución se representa calculando numéricamente el resultado con un número finito de cargas imagen. Los problemas se plantean para ser resueltos por estudiantes tomando como base problemas resueltos en los libros de texto.

El desafío de la enseñanza de la Física Experimental en Pandemia

• Isaac Funes,[1] Federico Gonzalez Vieyto,[1] Cecilia Mac Cormack,[1] Federico Marovic,[1] Stefanía Orozco Gil,[1] Juan Ignacio Peralta,[1] Mariano Poisson,[1] Martín Villalba,[1] Mariela Vieytes[1]

[1] *Universidad Nacional de Tres de Febrero*

La pandemia impactó de lleno en la enseñanza en todos los niveles y áreas. En particular, la mayoría de los cursos de laboratorio de física básica asociados a materias de distintas carreras universitarias, fueron suspendidos o reemplazados por cursos de simulaciones numéricas ante la imposibilidad de la presencialidad. Si bien estas simulaciones pueden aportar enormemente a fortalecer los conceptos de física, de ningún modo reemplazan el trabajo experimental con todas sus ricas y amplias posibilidades. En este trabajo presentamos nuestro desafío: continuar con el trabajo experimental diseñando nuevas prácticas y metodología, unificando los materiales entre los alumnos, abordando los temas de la presencialidad con la profundidad y el rigor que requiere la física universitaria. Luego de tres cursos realizados, en los que fuimos mejorando los puntos débiles a cada paso, más de 300 alumnos de los dos primeros años de distintas carreras lograron exitosamente concluir su cursada. Esta experiencia nos muestra nuevas posibilidades de abordaje del trabajo experimental, que aún en la nueva normalidad con presencialidad, pueden ser incorporadas ampliando las capacidades anteriores.

Interdisciplinariedad aplicada a la enseñanza de la física forense

• Silvia Inés Navarro,[1] María Luz Quiroga,[1] Gustavo Adolfo Juarez[1]

[1] *Dep. Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Catamarca*

Actualmente ante la situación sanitaria que vivimos, las circunstancias y medios para llevar adelante las prácticas educativas han cambiado. Por tanto, la utilización de las herramientas tecnologías se hicieron prioritarias, llevando a adoptar un modelo de enseñanza denominado aprendizaje invertido, el cual consiste en trasladar los saberes al exterior del aula, aprovechando el tiempo de clase y desarrollando las interacciones entre docente y estudiantes, con la visión interdisciplinaria aplicada a la Física Forense. Permitiendo desarrollar actividades vinculadas al tema de colisiones elásticas e inelásticas en accidentologia, las cuales requieren de conocimientos metodológicos que aportan a la interpretación de las leyes físicas y sus consecuencias. Esto posibilita al estudiante desarrollar habilidades en investigación, aportar esquemas para hallar soluciones a problemas de areas especificas, generar libertad de pensamiento que estimulan la participación colaborativa en la conformación de sus propios conceptos para afrontar con sensibilidad los cambios presentes en la realidad. El objetivo de este trabajo, es difundir la importancia de la interdisciplinariedad dentro del contexto práctico-operativo de la física forense, que requiere proporcionar significados propios que aportan soluciones a problemas de las realidades socio-histórico y culturales.

Una construcción casera, para mostrar el vínculo entre Young y Michelson en la enseñanza virtual

• Damián Gulich[1,2]

[1] *Centro de Investigaciones Ópticas (CIOp - CONICET - UNLP - CICPBA)*
[2] *Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata*

Física II es un curso de grado en Electromagnetismo básico que imparto para ingenieros, e incluye temas de la Óptica como una aplicación natural. Entre los muchos desafíos de realizar clases en video durante las restricciones locales de la epidemia de SARS-CoV-2 estaba el de encontrar material de demostración. En esta presentación, describo cómo estas restricciones me llevaron a desarrollar mi versión *casera* del experimento de Michelson como una alternativa al de Young, y cómo pude resaltar las circunstancias en las que ambos experimentos resultan ser dos casos particulares de la misma idea subyacente.

Construcción de dispositivos para la enseñanza de ondas estacionarias con materiales de fácil acceso

• Ernesto Cyrulies,[1] Horacio Daniel Salomone,[2,3] Néstor Armando Olivieri[3]

[1] *Instituto del Desarrollo Humano - Universidad Nacional de General Sarmiento*
[2] *Universidad Argentina de la Empresa*
[3] *Instituto de Industria - Universidad Nacional de General Sarmiento*

Se presentan una serie de actividades experimentales sobre fenómenos ondulatorios, trabajadas en un curso de formación continua para docentes de física de nivel medio de la provincia de Buenos Aires. Las actividades experimentales que se describen fueron desarrolladas durante dos encuentros en los laboratorios de la Universidad Nacional de General Sarmiento (UNGS). En este trabajo nos centramos en la descripción de la secuencia que se conformó con aquellas actividades experimentales, las que estuvieron específicamente dirigidas al estudio de las ondas estacionarias y su enseñanza utilizando dispositivos sencillos. Se muestran algunos resultados de la implementación de las actividades particularmente en términos de las discusiones didácticas que se generaron con el grupo de docentes.

Enfoque alternativo para pensar la enseñanza y el aprendizaje de Física Básica en la carrera de Biología Molecular

• Romina Torres Astorga,[1] Ana María Ungaro,[2,3] Myriam Villegas[4]

[1] *Instituto De Matemática Aplicada San Luis, CONICET-UNSL*
[2] *Carrera de posgrado EDU, Dir. de Capacitación, Secretarias Académica, UNLP*
[3] *Dirección de Orientación al Estudiante, Facultad de Informática, UNLP*
[4] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Físicas, Matemáticas y Naturales - Universidad Nacional de San Luis*

La asignatura Física de la carrera de Licenciatura en Biología Molecular presenta actualmente una propuesta de enseñanza con una estructura que responde a un modelo tradicional de la enseñanza. El mismo se caracteriza por centrarse en el contenido buscando incluir gran cantidad de unidades temáticas que hacen a la física general sosteniendo que tanto la enseñanza como el aprendizaje buscan la acumulación memorística del saber. Es por ello que este gran compendio de unidades y conceptos conforman una asignatura muy amplia y pesada a la vez para los y las estudiantes. El perfil particular propio de la carrera de Biología Molecular es diferente al perfil de la carrera de Física, sin embargo el abordaje que se le da a la asignatura Física dentro de la carrera de Biología Molecular está diseñado desde la óptica de un físico. Se propone entonces analizar críticamente la propuesta curricular de la asignatura para identificar ejes problemáticos centrales para la enseñanza de la física acordes al perfil de formación de los estudiantes de Biología Molecular. Este punto de partida nos aporta insumos y fundamentos pedagógicos para pensar una alternativa sobre la reestructuración del programa de la asignatura. Esta propuesta curricular busca pararse desde otro paradigma de trabajo pedagógico y darle mayor espacio y profundidad a los contenidos que son esenciales, un trabajo didáctico metodológico desde la enseñanza de la física. La intención es utilizar el enfoque de aprendizaje basado en problemas, los cuales sean de real interés para la carrera de bióloga molecular. El trabajo colaborativo entre estudiantes tanto en el aula como fuera de esta conforma uno de los ejes principales de la innovación metodológica propuesta. Desde este enfoque de enseñanza el trabajo de las y los docentes es el de andamiaje, guía, orientando a sus estudiantes en el desarrollo de las actividades. En el marco de estas líneas la intención es re-plantear la estructura de la enseñanza de la asignatura hacia una organización que propone una dimensión de trabajo pedagógico en reemplazo de 3 compartimentos separados como son las clases teóricas, prácticas y laboratorios. Esta adaptación del programa y de la metodología de enseñanza busca colocar al estudiante como un sujeto activo en torno a los conceptos útiles para su formación como a las prácticas relativas a la forma de hacer ciencia cuando se busca responder preguntas científicas.

Resultados de Exámenes Presencial vs. Virtual: Experiencia en Cursos de Física General

• Walter Reimers,[1] C. Romina Luna[1]

[1] *Departamento de Física - Universidad Nacional del Sur*

En este trabajo se hace un análisis de los resultados de exámenes de un curso de Física General en un período de 8 años (2014-2021). Dicho período incluye un año y medio de dictado no presencial (virtual) debido a la pandemia Covid-19.
La misma es una materia de servicio, y se dicta en los primeros años de las carreras de Agronomía, Geología, Tecnicatura en Medio Ambiente y Arquitectura en la Universidad Nacional del Sur (UNS). La materia consta de 5 módulos generales: Mecánica, Fluidos, Termodinámica, Electricidad y Óptica Geométrica.
El cursado de la misma consta de dos exámenes con un recuperatorio general al finalizar el cuatrimestre. El temario de cada examen es el siguiente:
Examen 1: Cinemática, Dinámica y Energía
Examen 2: Fluidos y Termodinámica
El 60 % de los alumnos/as que se inscriben en la materia, intenta cursar la misma, rindiendo al menos un examen. De este porcentaje un 20 % aproximadamente pierde el cursado. Se observa, en promedio, un aumento de aproximadamente 10 puntos en el segundo examen respecto al primero. Esto se explica ya que los temas del primer examen (cinemática y dinámica) presentan mayor dificultad para los alumnos/as a la hora de resolver problemas y comprender resultados. En estudios previos [1] se verifica esta última aseveración, como así también en encuestas realizadas a los alumnos/as, donde un 85 % expresa tener mayor dificultad de comprensión en esos dos temas.
Se observa que durante los años presenciales de estudio (2014-2019), un 19 % desaprueba el cursado (ya sea por abandono de la materia, o por desaprobar el recuperatorio); mientras que para los años de dictado No Presencial (2020-2021) se incrementa ligeramente este porcentaje (21 %).
Durante el dictado virtual, se realizaron también dos trabajos Integradores, en donde se discute en grupos de 3 o 4 alumnos/as y con un docente a cargo, un problema de mayor complejidad respecto a los ejercicios que se encuentran en las guías de práctica. Luego se realizaron encuestas donde un 56 % manifestó que le ayudó MUCHO esta metodología de trabajo para comprender los conceptos de cinemática y dinámica, un 28 % comprendió mejor los conceptos y un 16 % le fue indiferente.
Se preguntó también a los alumnos/as si les gustó la modalidad Virtual del dictado de la materia, donde un 73 % respondió de manera afirmativa, y respecto a la conectividad de Internet, un 60 % respondió que tuvo algún problema de conexión.
Si bien no hemos obtenido cambios significativos en cuanto a resultados de exámenes de la modalidad presencial respecto a la virtual, la enseñanza presencial-virtual, podría ser una buena alternativa. Creemos que la virtualidad presenta algunas ventajas, como por ejemplo, el grabado de clases, más disponibilidad de horarios de consulta (virtual) ya que no requiere espacio físico, entro otros.

Referencias:

[1] Reimers, W. Fuente, S. Branda, M. M. Morgade C. *La discusión y la argumentación como herramienta de aprendizaje en clases obligatorias*, V Jornadas Nacionales y Latinoamericanas de Ingreso y Permanencia en Carreras Científico-Tecnológicas (2016).

Teorema de Noether: del contenido a la forma

• Rafael González,[1] Tomás Orlando Michi[1]

[1] *Instituto del Desarrollo Humano - Universidad Nacional de General Sarmiento*

En este trabajo se plantea una metodología novedosa, basada en la teoría semiótica-cognitiva del aprendizaje [1], para abordar la enseñanza-aprendizaje de la Física, en el nivel terciario-universitario. Se ejemplifica con un tema de Mecánica Lagrangiana, una materia que suele ser puerta de entrada al nivel superior de profesorados y licenciaturas en Física, y con el Teorema de Noether (por su importancia teórica y conceptual), que vincula las simetrías de las configuraciones mecánicas, con las integrales primeras de movimiento correspondientes. En lugar de la forma clásica de presentar el teorema, mediante el enunciado, la demostración y la ejemplificación, se parte de un cuadro de propiedades (entre ellas simetrías y conservaciones de distintas configuraciones específicas) que, se solicita al estudiante relacionar de manera hipotética, para recién luego, darles una expresión formal en base a las ecuaciones de Lagrange, mediante un procedimiento recursivo del que se extrae como esquema conceptual, la demostración del teorema que, finalmente, se aplicará en forma genérica, desprendida de las configuraciones específicas previas.

Referencias:

[1] R. González, *"Rolando García y la teoría de la equilibración Ensayo de una teoría semiótica-cognitiva del aprendizaje basada en las tríadas dialécticas" ¡No está muerto quien pelea! Homenaje a la obra de Rolando V. García Boutigue*, CEIICH UNAM, México (2018). ceiich.unam.mx

Análisis de opciones para muestreo de PM 2.5 en Área Natural afectada por incendios que no cuenta con suministro convencional de energía eléctrica

• Maria Fernanda Valle Seijo,[1] Maria Virginia Binet,[1] Greta Piñol,[1] Ivan Novara,[1,2] Maria Isabel Micheletti[1,3]

[1] *Instituto de Física de Rosario, CONICET-UNR*
[2] *Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura - Universidad Nacional de Rosario*
[3] *Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas - Universidad Nacional de Rosario*

Las áreas naturales son fuente de aerosoles propios de ese tipo de entorno pero también en ellas ocurren eventos de origen antropogénico de alta contaminación, que afectan severamente la calidad del aire, como es el caso de los incendios intencionales que se extienden por vastas áreas causando la degradación de los ecosistemas y del aire. Éste se contamina con los aerosoles que resultan de las quemas, los cuales son arrastrados por los vientos, incidiendo particularmente en las zonas aledañas. Si entre dichas zonas se emplaza un complejo urbano de más de un millón de habitantes, como en el caso del Gran Rosario, estos eventos resultan críticos, produciendo importantes efectos perjudiciales en la salud y calidad de vida de numerosas personas simultáneamente, congestión en los sistemas de salud, entre otros muchos efectos adversos. Es, por tanto, de interés el monitoreo del particulado atmosférico en las zonas naturales, tanto en los casos de eventos de alta contaminación como fuera de ellos, para evaluar la situación de los aerosoles generados por las fuentes locales, su desplazamiento y evolución, lo que permite desacoplar el material particulado atmosférico generado en este tipo de entorno del procedente de otras fuentes, al analizar los aerosoles en lugares cercanos. Pero en los sitios naturales existe el problema del suministro energético, necesario para el uso de muestreadores que deben operar de manera ininterrumpida durante algunos días, mientras las partículas atmosféricas van quedando capturadas en filtros para su posterior análisis. Este trabajo evalúa distintas opciones para realizar muestreos de PM2.5, teniendo en cuenta los costos/beneficios de éstas, su eficiencia energética, factibilidad. Asimismo, se evalúa la situación de aerosoles atmosféricos en un sitio natural escogido en una isla frente a Rosario, mediante análisis satelitales de los incendios de la zona, retrotrayectorias de masas de aire con programa HYSPLIT y análisis de variables atmosféricas.

Estudio comparativo entre datos de Cloudsat y GOES-16 para clasificación de tipos de nubes

• Paula Verónica Romero Jure,[1] Sergio Masuelli[1,2]

[1] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*
[2] *Comisión Nacional de Actividades Espaciales (CONAE) Centro Espacial Teófilo Tabanera*

Este trabajo tiene como objetivo comparar las señales adquiridas, sobre la región de Sudamérica, por dos instrumentos satelitales distintos principalmente en cuanto a geometría de adquisición y longitudes de onda de trabajo. Estas diferencias permiten a estos instrumentos satelitales obtener características complementarias sobre los distintos tipos de nubes. El primero de estos instrumentos es el ABI (Advanced Baseline Imager) a bordo del satélite geoestacionario GOES-16, un radiómetro de 16 bandas en el rango espectral que abarca desde el visible hasta el infrarrojo de onda larga. ABI genera imágenes con píxeles de 2 km de lado (en su resolución más gruesa) de todo el continente americano en intervalos de 15 minutos. Se utilizaron productos de nivel 2 CMI para generar imágenes estándar de microfísica de nubes. El otro instrumento es el CPR (Cloud Profiling Radar) a bordo del satélite de órbita heliosincrónica CloudSat, un radar de frecuencia 94 GHz capaz de obtener perfiles verticales de nubes sobre una región de 1,1 km de diámetro, realizando cuatro pasadas diurnas como máximo sobre Sudamérica. Se utilizaron los productos de nivel 2 CLDCLASS, que dan una clasificación de tipo de nubes para 10 alturas. Mediante un procesamiento estadístico de los datos se estudió la correspondencia de la información provista por estos dos instrumentos, para unas 100 pasadas, para la clasificación de tipos de nubes. Cabe señalar que para realizar este procesamiento ha sido importante resolver la co-localización espacio-temporal para ambos conjuntos de datos.

Colectores de gases de efecto invernadero: análisis numérico y analítico

• Ramiro Andrés Mansilla,[1] Pablo Correa,[1] Juan Manuel Gomba,[1] Paula Juliarena,[1] Patricia Ricci,[2] Banira Lombardi[1]

[1] *Instituto de Física Arroyo Seco (CIFICEN-CONICET), Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires*
[2] *Instituto Nacional de Tecnología Agropecuaria (INTA) - Conicet*

Mediante simulaciones numéricas y cálculos analíticos, se reproduce el llenado con metano (CH4) de colectores presurizados y se contrastan con resultados experimentales. Los experimentos se realizaron dentro de una cámara controlada que contiene un bovino, además de aparatología que permite monitorear a tiempo real la concentración de CH4 dentro de la cámara. Se colocó en el ollar del bovino un colector presurizado, que consiste en un cilindro de acero a una presión interna inicial de 45 Pascales, con un restrictor de flujo a través del cual ingresa aire del ambiente. Modelamos la captura del aire hacia el colector y, dado que la concentración instantánea de CH4 en el ambiente es conocida, calculamos la concentración dentro del colector. Por otra parte, simulamos numéricamente el mismo proceso resolviendo el flujo de Darcy acoplado a la ecuación de convección-difusión para determinar la concentración dentro del colector a distintos periodos de tiempo. Ambos resultados, analíticos y numéricos, se contrastan con los experimentales.

Procesamiento digital de imágenes satelitales para determinar cambios del ambiente geográfico en la provincia de Salta en los últimos 20 años

• Facundo Ismael Casasola,[1,2,3] Lidia Ana Otero[1,4]

[1] *Universidad de la Defensa Nacional, Facultad de Ingeniería del Ejército*
[2] *Instituto Geográfico Nacional*
[3] *Universidad Tecnológica Nacional - Facultad Regional Buenos Aires*
[4] *CITEDEF, UNIDEF (MINDEF-CONICET)*

Junto a los mares y océanos, los bosques son indispensables para el mantenimiento de la biodiversidad de los ecosistemas y para la regulación del clima del planeta en general. Según el Primer Inventario Nacional de Bosques Nativos (PROYECTO BOSQUES NATIVOS Y ÁREAS PROTEGIDAS BIRF 4085-AR 1998-2005 REPÚBLICA ARGENTINA INFORME NACIONAL), el primer dato disponible sobre la superficie efectiva de bosque de la República Argentina corresponde al Censo Nacional Agropecuario del año 1937 que indica una superficie de 37.535.308 hectáreas de bosques nativos para ese año. Según Informes del INTA, la vegetación original, en particular los bosques secos, del Chaco Seco están siendo reemplazados rápidamente por extensos campos de cultivo y pastizales a una tasa de cambio importante. Año tras año los bosques nativos se ven reducidos en su superficie, lo que implica un cambio en la dinámica del uso del suelo. Esto trae aparejado modificaciones en el ambiente geográfico y en las variables climáticas en las regiones. En este trabajo se presenta un análisis espacio-temporal del proceso de desforestación en la Región de la Selva Tucumano Boliviano de la provincia de Salta y su impacto en el cambio del ambiente geográfico de la zona durante los últimos 20 años utilizando procesamiento digital de imágenes MODIS (TERRA-AQUA), SENTINEL y LANDSAT.

Evaluación de la incidencia de los incendios en las islas del Paraná y del uso del suelo, en la calidad del aire de sitios del Gran Rosario ubicados de Norte a Sur en zonas cercanas a la costa

• Greta Piñol,[1] Maria Fernanda Valle Seijo,[1] María Virginia Binet,[1] María Isabel Micheletti[1,2]

[1] *Instituto de Física de Rosario, CONICET-UNR*
[2] *Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas - Universidad Nacional de Rosario*

La ciudad de Rosario se encuentra expuesta al humo de los incendios generados en las islas del Paraná, situadas frente a su costa, lo que afecta significativamente la calidad del aire de esta ciudad, afectando la salud y calidad de vida de sus habitantes, así como el patrimonio cultural y artístico de la ciudad. En el presente trabajo se evalúa la influencia de los incendios en las distintas áreas cercanas a la costa del Gran Rosario, eligiendo sitios de referencia de Norte a Sur. Se evalúa, además, la influencia de otros factores contaminantes en relación al uso del suelo, que pueden contribuir a agravar la situación en determinadas áreas representadas por los sitios seleccionados. Para ello se analizan zonas costeras o aledañas, de los siguientes tipos: industriales-portuarias, céntricas y macrocéntricas, rurales. Se analizan datos satelitales y se evalúa la influencia de variables meterológicas y del desplazamiento de las masas de aire -analizadas mediante retrotrayectorias con el programa HYSPLIT- en el arribo de aerosoles de quema y de otros orígenes, a los sitios estudiados.

Paleointensidades y caracterización magnética en el estudio de sedimentos lacustres

• María Ángela Llera,[1] Alicia Torres,[2] Fernando Saracso[3]

[1] *Instituto de Ciencias - Universidad Nacional de General Sarmiento*
[2] *Facultad de Ingeniería - Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco*
[3] *Facultad de ciencias físicas y matemáticas. Universidad de Chile*

Los testigos de sedimentos lacustres nos permiten acceder a un registro continuo de datos que describen su historia con parámetros físicos, climáticos, químicos, biológicos,etc. Se considera que la mayoría conserva un buen registro de parámetros magnéticos que, junto al cambio en el tamaño de grano, y la mineralogía magnética permite acceder a información fiable para reconstruir los cambios climáticos sufridos por una muestra desde el pasado. También, el trabajo con sedimentos permite inferir variaciones paleoseculares y paleointensidades relativas del campo magnético terrestre, esto constituye la memoria que permite construir la historia geológica, morfológica y climática de la zona de estudio.
En este trabajo se presentan los resultados obtenidos del estudio de parámetros magnéticos en un perfil recolectado en la formación Laguna del Toro, en la provincia de Chubut. Las propiedades magnéticas mostraron amplias variaciones a lo largo del perfil, evidenciando la magnetita como portador magnético principal. En conjunto con el análisis geomorfológico y la variación en el tamaño de grano se evidencia un cambio en los regímenes de lluvia de la zona.
Los estudios paleomagneticos nos permiten obtener el valor de declinación del campo magnético. Para la datación del testigo se utilizó la curva de paleointensidad relativa realizando la correlación con varios parámetros relacionados linealmente entre sí. La PIR obtenida por la normalización de la MRN 20mT fue re-normalizada con la medida de curva completa. Las curvas de desmagnetización mostraron componentes estables a partir de los 15mT. La inclinación y la declinación brindan valores levemente alterados respecto del modelo de dipolo geocéntrico axial. Pero son valores propios de las variaciones direccionales del campo magnético terrestre y la forma en que se graban en los sedimentos lacustres, con los datos presentados no es posible adjudicar dichas variaciones a un movimiento rotacional del basamento.

Años 2020 y 2021: récords de incendios forestales en regiones de Argentina y México

• Karen Giselle López Cárdenas,[1] Adriana Ipiña,[2] Gamaliel López-Padilla,[3] Rubén D. Piacentini[2]

[1] *Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, UANL, México*
[2] *Instituto de Física de Rosario, CONICET-UNR*
[3] *Centro de Investigación en Matemáticas, CONACYT, México*

La quema de pastizales para generar el rebrote de especies forrajeras es una práctica común en el Delta del río Paraná ubicado entre las provincias de Entre Ríos y Santa Fe, Argentina. En el año 2020 esta región tuvo por escenario el mayor número de focos de incendios del que se tiene registro, en medio de una intensa sequía y el nivel más bajo del río Paraná en los últimos 50 años. Estas quemas ocurrieron casi de manera continua entre junio y agosto, generando un impacto sin precedentes en la calidad del aire de la ciudad de Rosario. Por otro lado, en marzo del 2021, se detectaron los primeros focos de incendios forestales sobre la Sierra Madre Oriental que atraviesa los Estados de Nuevo Léon y Coahuila, en México. La falta de precipitación, la vegetación seca producto de las bajas temperaturas y las ráfagas de viento seguidas del fuego imprudencial, provocaron los incendios más extensos de la última década. La aparición y propagación de los focos de incendios fueron analizadas en ambos sitios, por medio de las mediciones del instrumento satelital VIIRS/NOAA-20, disponible en la plataforma FIRMS-NASA. Estos datos fueron procesados con un código propio, encontrando que los máximos diarios de focos de incendios alcanzaron 521 en los humedales del río Paraná frente a Rosario (junio-agosto 2020) y 265 en las Sierras de Nuevo León y Coahuila (marzo 2021). El presente trabajo presenta una secuencia de la evolución de los focos de incendios sobre los diferentes terrenos y condiciones meteorológicas. Se discute la posible influencia del cambio climático en estas cifras récord.

Caracterización de imágenes satelitales de dos campos de exterminio en el noreste de México

• Gamaliel López-Padilla,[1] María Luisa Castellanos-López,[2] Adriana Ipiña[3]

[1] *Centro de Investigación en Matemáticas - Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología*
[2] *Facultad de Trabajo Social y Desarrollo Humano - Universidad Autónoma de Nuevo León*
[3] *Instituto de Física de Rosario, CONICET-UNR*

Durante más de una década en el noreste de México, las familias de personas desaparecidas enfrentaron la búsqueda de sus seres queridos prácticamente solas, con un limitado o incluso, inexistente apoyo institucional. Actualmente, la localización de personas es un trabajo que lleva a cabo la Fiscalía General de Justicia del Estado de Nuevo León (FGJNL), la Comisión Local de Búsqueda (CLB) y la Comisión Nacional de Búsqueda (CNB), con la participación de las familias quienes juegan un papel fundamental. En este contexto, el apoyo de expertos en distintas disciplinas que faciliten herramientas para la búsqueda, es de vital importancia. Con este propósito, en este trabajo se realizó un análisis de imágenes satelitales a lo largo del periodo 2006-2019 en dos campos de exterminio del noreste de México. La ubicación de estos sitios se logró principalmente por la información brindada por los familiares de las víctimas. Se analizaron imágenes satelitales en escala de grises, empleando una técnica de detección de contornos y segmentación en zonas específicas (operador sobel). Basado en un método de detección de gradientes, se aplicó un procesamiento para encontrar la probabilidad de que un pixel sea el contorno de un objeto, distinto al relieve. Por medio de estas operaciones se encontraron variaciones en la secuencia de imágenes. Se mostraron cambios en la superficie terrestre donde se identificaron marcas en el suelo, ocasionadas por el paso de vehículos y deforestación, revelando que en esa zona existió actividad humana. Los resultados de esta técnica fueron coincidentes con el área señalada para la prospección por parte del equipo interinstitucional del 'Plan de Búsqueda de las Abejas' el cual esta conformado por personal de la CNB, la CLB y el Instituto de Criminalística y Servicios Periciales de la FGJNL.

Estudio de sensibilidad del modelo WRF-ELEC empleando distintas parametrizaciones del mecanismo de electrificación no-inductivo

• Malena Contizanetti ,[1] Rodrigo Bürgesser,[2] Juan José Ruiz,[3,4] Melina Luque[2]

[1] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*
[2] *Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación, Universidad Nacional de Córdoba, Instituto de Física Enrique Gaviola CONICET-UNC*
[3] *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires*
[4] *Centro de Investigaciónes del Mar y la Atmósfera, CIMA - CONICET*

En nuestro país, la actividad eléctrica atmosférica es de suma relevancia y la vulnerabilidad frente a dicho fenómeno es particularmente alta en las regiones centro y norte del país. Numerosos estudios han demostrado que la tasa de actividad eléctrica está fuertemente correlacionada con la ocurrencia de eventos severos. Comprender detalladamente los mecanismos que desencadenan la electrificación de las nubes de tormenta, contribuye a un mejor entendimiento de la actividad eléctrica, de su evolución y de su correlación con eventos severos. El modelo WRF-ELEC simula el desarrollo y evolución de la actividad eléctrica en las nubes de tormenta empleando diversas parametrizaciones del mecanismo de electrificación no-inductivo. Cada parametrización otorga resultados distintos y en ciertos casos, las diferencias son muy significativas. En este trabajo se propone analizar las diferencias entre los resultados debido al uso de distintas parametrizaciones del mecanismo de electrificación no-inductivo y estimar cuál de las parametrizaciones disponibles en el WRF-ELEC, ajusta mejor los datos de campo de la actividad eléctrica de nuestra región haciendo uso de los datos obtenidos durante la campaña RELAMPAGO.

Anomalías meteorológicas en el periodo 2020-2021: influencias en el incremento de incendios en el Delta del río Paraná

• Adelina Navarro,[1] Florencia Gomez-Fava,[1] Gamaliel López-Padilla,[2] Adriana Ipiña Hernandez[3]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura - Universidad Nacional de Rosario*
[2] *Facultad de Ciencias Físico Matemáticas - UANL*
[3] *Área Física de la atomósfera, radiación solar y astropartículas, Instituto de Física Rosario CONICET-UN Rosario*

Desde hace ya varias décadas que cada invierno, la ciudad de Rosario y alrededores reciben el humo y las partículas emitidas por las quemas en las islas del río Paraná. El uso del fuego para eliminar la vegetación nativa, comienza con las primeras heladas de Mayo y terminan a finales de Agosto. Las condiciones climáticas juegan un papel muy importante en la acumulación y propagación de la contaminación. El año 2020 marcó a los habitantes de la región por la pandemia de COVID-19 y las cifras récord de incendios. En el presente estudio se procesaron mediciones de precipitación, humedad, temperatura, dirección y velocidad de los vientos en el periodo Junio-Agosto de los años 2010, 2015 y 2020 para la identificación de anomalías meteorológicas. Por otro lado, se analizaron las mediciones diarias de PM2.5 y su correlación con el número de focos de incendios durante el año 2020. Los resultados para los valores de humedad y temperatura, muestran una disminución del 10% y 3% respectivamente, así como una reducción de la precipitación acumulada de aproximadamente un 70%, con respecto a años anteriores. Esta problemática sigue ocurriendo actualmente en la región frente a Villa Constitución-San Nicolás, donde en el mes de Junio 2021 fueron identificados al menos 36 incendios de gran extensión. Los valores de PM2.5, se estimaron en promedio, un 58% más altos que aquellos en las zonas no afectadas por el humo. Se discute el impacto en la calidad del aire de los incendios en el Delta del río Paraná y la influencia de las anomalías meteorológicas.

La isla de calor urbano entre 2018 y 2020 en la ciudad de Córdoba, Argentina

• Maria Lila Asar,[1] Elizabet Lilia Estallo,[2] Elisabet Marina Benitez,[2] Hector Miguel Di Benedetto,[1] Francisco Felipe Ludueña Almeida[1,2]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas Físicas y Naturales - Universidad Nacional de Córdoba*
[2] *Instituto de Investigaciones Biológicas y Tecnológicas–CONICET–Universidad Nacional de Córdoba*

El efecto de isla de calor urbano (ICU) ha sido ampliamente documentado en la literatura climática, desde las primeras observaciones hechas por Luke Howard en 1833, en la ciudad de Londres, Inglaterra. Este fenómeno se manifiesta cuando las áreas urbanas experimentan mayores temperaturas que las áreas no urbanas que la rodean.
En el presente trabajo se llevó a cabo un estudio para analizar el fenómeno ICU en la ciudad de Córdoba, mediante el análisis de datos obtenidos en estaciones meteorológicas ubicadas dentro de la ciudad y en localidades próximas, entre los meses de enero de 2018 hasta noviembre de 2020. Los resultados del estudio permiten confirmar la presencia del efecto ICU, reafirmando estudios preliminares realizados por Maristany et al (2008) y de la Casa y Nasello (2014).
Se detectó la presencia del efecto ICU en la ciudad de Córdoba, siendo más intenso durante los meses de invierno. Los valores medios estacionales son 2,9 °C en invierno, 2,4 °C en primavera, 2,3 °C en verano y 2,2 °C en otoño. El efecto fue particularmente notable en las temperaturas mínimas.
Se observó que la lluvia desempeñaría un papel importante en la mitigación del efecto ICU, disminuyendo las temperaturas dentro de la ciudad.

Estudio teórico-experimental del fármaco paracetamol adsorbido en silica: efecto del pH y la fuerza ionica

• Emilia Noseda Grau,[1] Gabriela Dodero,[1] Agustín Spaltro,[2] Danila Ruiz,[3] Sandra Simonetti[1,4]

[1] *Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. L. N. Alem 253, B8000CPB - Bahía Blanca, Argentina.*
[2] *CEQUINOR (CCT-La Plata), Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, CC 96, 1900, La Plata, Argentina*
[3] *CEDECOR (UNLP-CICBA), CONICET, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, 47 y 115, 1900 La Plata, Argentina*
[4] *Universidad Tecnológica Nacional (UTN), 11 de Abril 61, B8000LMI - Bahía Blanca, Argentina.*

Los contaminantes emergentes, como los residuos de medicamentos y productos farmacéuticos, se encuentran en aguas residuales, ríos y otras corrientes superficiales. Su eliminación se ha convertido en una de las mayores preocupaciones ambientales, debido al impacto que tienen en la salud humana y los efectos nocivos que generan en la naturaleza. La adsorción es una de las técnicas más eficientes, prometedoras y ampliamente utilizadas en los procesos de tratamiento de aguas residuales. En este trabajo estudiamos la adsorción del fármaco paracetamol de una solución acuosa en un adsorbente comercial de sílica gel. Se obtienen las isotermas de equilibrio para el paracetamol en el adsorbente mencionado y se discuten los resultados en relación con las propiedades fisicoquímicas del adsorbente y las propiedades de la solución. La capacidad de adsorción del adsorbente esta fuertemente influenciada por el pH y la fuerza iónica en la solución, obteniendo los mejores valores en condiciones ácidas a pH=3 y la fuerza iónica 1M. Los cambios se deben a la alteración de la química de la superficie de acuerdo con el pH de la solución acuosa. Los cálculos DFT mostraron una buena correlación con los resultados experimentales, proporcionando detalles atomísticos a través del modelado molecular. Las cargas del paracetamol son débilmente atraídas por los grupos superficiales silanol de la sílica a través de la adsorción física. La adsorción sigue una cinética de pseudo segundo orden, y los datos de equilibrio se ajustan al modelo de Langmuir. Los resultados mostraron que las capacidades de adsorción de la sílica son adecuadas para la eliminación del paracetamol presente en el agua.

Estudio comparativo entre datos de CloudSat y GOES-16 para clasificación de tipos de nubes

• Paula Verónica Romero Jure,[1] Sergio Masuelli[1,2]

[1] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*
[2] *Comisión Nacional de Actividades Espaciales (CONAE) Centro Espacial Teófilo Tabanera*

Este trabajo tiene como objetivo comparar las señales adquiridas, sobre la región de Sudamérica, por dos instrumentos satelitales distintos principalmente en cuanto a geometría de adquisición y longitudes de onda de trabajo. Estas diferencias permiten a estos instrumentos satelitales obtener características complementarias sobre los distintos tipos de nubes. El primero de estos instrumentos es el ABI(Advanced Baseline Imager) a bordo del satélite geoestacionario GOES-16, un radiómetro de 16 bandas en el rango espectral que abarca desde el visible hasta el infrarrojo de onda larga. ABI genera imágenes con píxeles de 2 km de lado (en su resolución más gruesa) de todo el continente americano en intervalos de 15 minutos. Se utilizaron productos de nivel 2 CMI para generar imágenes estándar de microfísica de nubes. El otro instrumento es el CPR(Cloud Profiling Radar) a bordo del satélite de órbita heliosincrónica CloudSat, un radar de frecuencia 94 GHz capaz de obtener perfiles verticales de nubes sobre una región de 1,1 km de diámetro, realizando cuatro pasadas diurnas como máximo sobre Sudamérica. Se utilizaron los productos de nivel 2 CLDCLASS, que dan una clasificación de tipo de nubes para 10 alturas. Mediante un procesamiento estadístico de los datos se estudió la correspondencia de la información provista por estos dos instrumentos, para unas 100 pasadas, para la clasificación de tipos de nubes. Cabe señalar que para realizar este procesamiento ha sido importante resolver la co-localización espacio-temporal para ambos conjuntos de datos.

Estimación hidroquímica de la cuenca del río Chaschuil

• Erlinda del Valle Ortiz,[1,2] Marcelo Ernesto Savio,[1] Cinthia Alejandra Lamas,[1] Gustavo David Rodriguez,[1] Romina de los Ángeles Ortega[1]

[1] *Instituto de Monitoreo y Control de la Degradación Geoambiental - IMCoDeG - Fac. de Tecnología y Cs. Aplicadas - UNCa*
[2] *CONICET*

Dentro de los recursos naturales el agua es el más limitante, cuya escasez hace imperiosa la necesidad de estudios eficientes y sustentables para su conservación y uso, sobre todos si se trata de zonas donde el recurso es escaso. La zona de estudio es el Valle de Chaschuil que se encuentra al Oeste de la localidad de Fiambalá, Departamento Tinogasta de la Provincia de Catamarca. El presente trabajo está enfocado en el estudio hídricoquímico ubicado a lo largo de la cuenca, con 20 puntos seleccionados para el muestreo que se determinaron por la unidad geológica predominante o cambios que se producen en el cauce del mismo, previamente mapeadas por imágenes satelitales. El objetivo es remarcar las zonas de alta conductividad además de otros parámetros determinados in situ. Los resultados obtenidos nos permiten identificar puntos definidos con parámetros aptos dentro de las normas OMS que son las áreas más adecuadas para un mayor aprovechamiento del agua y el desarrollo sustentable de la región.

Modelos de Transporte Atmosferico aplicados al Diseño de Facilidades Nucleares

• Mariana Alessi[1]

[1] *INVAP S.E. Investigaciones Aplicadas Sociedad del Estado*

Las emisiones de xenón proveniente de instalaciones de producción de radioisótopos médicos (Medical Isotope Production Facilities MIPF) y otras instalaciones nucleares, afectan la capacidad de verificación y control del Sistema Internacional de Monitoreo (IMS), de la Organización del Tratado de Prohibición Completa de Ensayos Nucleares CTBTO (Comprehensive Nuclear-Test-Ban treaty Organization).
En un esfuerzo por minimizar el impacto del radioxenón en la atmosfera, y con el fin de mitigar, en general, la emisión de radionucleidos, en INVAP se aplican Modelos de Transporte Atmosférico (ATM-Atmospheric Transport Models) en las diferentes etapas del diseño y desarrollo de instalaciones nucleares. Estos modelos, junto con otras herramientas de diseño y medición, permiten realizar estudios de seguridad radiológica y emisión de efluentes gaseosos, tanto en operación normal como en escenarios accidentales.
En este trabajo, se muestran diferentes herramientas de análisis utilizadas por INVAP durante el diseño y desarrollo de MIPFs y Reactores de Investigación. Así mismo, se exponen ejemplos de casos de análisis en diferentes escenarios, donde se aplican modelos analíticos y comerciales de ATM, basados en parámetros de emisión, parámetros de diseño de las facilidades nucleares, condiciones meteorológicas y parámetros del sitio, entre otros.

Materialización del metro argentino: Método de excedentes fraccionarios con única longitud de onda y criterio de error normalizado

• Liliana Alvarez,[1] Ricardo Iuzzolino,[1] Gastón Giarmana,[1] Karina Beatriz Bastida,[1] Natalia Diaz[1]

[1] *Instituto Nacional de Tecnología Industrial*

La realización y materialización de la unidad de longitud del sistema internacional de unidades (SI), para el rango de longitudes cortas (menor a 1 m), se efectúa a partir de técnicas interferométricas. Dichas técnicas se aplican a la medición de patrones materializados utilizando el método de excedentes fraccionarios. Este método consiste en medir el desfasaje de dos patrones de interferencia, uno correspondiente a una superficie de referencia y otro correspondiente a la longitud que se pretende medir. Conociendo la longitud nominal del patrón materializado, y utilizando al menos dos longitudes de onda muy bien definidas es posible determinar sin ambigüedad la única solución posible para la longitud bajo medición. En este trabajo se presenta una alternativa de dicho método, utilizando una única longitud de onda y conociendo un valor histórico de la medición, lo que permite aplicar criterios de aceptación/rechazo de una medición tal como la de error normalizado. La incertidumbre combinada de la medición de la longitud con el nuevo método se incrementa tan sólo en un par de nanómetros y resuelve situaciones en las que no es posible contar con la menos dos radiaciones trazables al patrón nacional de tiempo y al patrón nacional de longitud.

Post-procesamiento de imágenes de resonancia magnética nuclear adquiridas con tecnología de campo magnético ciclado

• Jeremías Farrher,[1] Esteban Anoardo[1]

[1] *Laboratorio de Relaxometría y Técnicas Especiales, Grupo de Resonancia magnética Nuclear, FaMAF-UNC e IFEG-CONICET*

La tomografía por RMN (también conocida como IRM), es exitosamente utilizada en aplicaciones biomédicas para obtener imágenes del interior del cuerpo humano y en animales, principalmente como herramientas de diagnóstico y estudios preclínicos. La técnica de campo ciclado (field cycling) es una variante utilizada cuando es deseable evolucionar al sistema de espines en un campo magnético de baja intensidad, o cuando un experimento debe repetirse a diferentes valores de campo magnético [1].
En este trabajo se utiliza un prototipo de aparato desarrollado en el Larte que consiste en un relaxómetro de campo ciclado con capacidad de hacer imágenes [2]. El instrumento fue pensado especialmente para el diseño de nuevos agentes físicos y químicos de contraste [3,4], así como para estudios preclínicos en pequeños animales. Hasta el momento se ha puesto énfasis en la obtención de imágenes en condiciones extremas de homogeneidad y estabilidad del campo magnético. Esta premisa responde a una ecuación de costos, en la cual, la simplificación del hardware involucrado es transferida al software, es decir, a herramientas de post-procesamiento de las imágenes adquiridas. Como resultado, las imágenes generadas están severamente afectadas por diferentes tipos de ruidos y deformaciones, comprometiendo la evaluación visual y el análisis informático de las mismas.
Con el fin de lograr correcciones específicas a los problemas típicos que se manifiestan en las imágenes adquiridas con nuestro prototipo, se estudiaron diferentes combinaciones de algoritmos conocidos. Además, se implementaron herramientas métricas que permiten comparar diferentes algoritmos y valorar la calidad de las imágenes procesadas. Dicho proceso de filtrado se realiza en imágenes adquiridas con nuestro prototipo, utilizando fantomas pre-diseñados con colores binarios en gris con el objetivo de encontrar los filtros óptimos. Por último, se analiza el desempeño de los filtros implementados en imágenes más complejas de roedores, las que presentan varias intensidades de grises, y a las que se le agrega diferentes tipo de ruido.

Referencias:

[1] L. M. Broche, P. J. Ross, G. R. Davies, M-J MacLeod and D. J. Lurie, *A whole-body Fast Field-Cycling scanner for clinical molecular imaging studies*, Sci. Rep. **9**, 10402 (2019).
[2] A. J. Romero, G. G. Rodriguez and E. Anoardo, J. Magn. Reson. **311**, 106682 (2020).
[3] G. G. Rodriguez, E. M. Erro and E. Anoardo, *Fast iron oxide-induced low-field magnetic resonance imaging*, J. Phys. D: Appl. Phys. **54**, 025003 (2021).
[4] G. G. Rodriguez and E. Anoardo, *Proton Double Irradiation Field-Cycling Nuclear Magnetic Resonance Imaging: Testing New Concepts and Calibration Methods*, IEEE Trans. Instrum. Meas. **70**, (2021).

Estudio teórico comparativo de NaF acuoso sobre TiO2(101) anatasa y TiO2(110) rutilo

• Lorena Meier,[1] Ana Belén Schvval,[1,2] Cecilia Ines Nora Morgade[1,3]

[1] *Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. L. N. Alem 1253, B8000CPB - Bahía Blanca, Argentina.*
[2] *Departamento de Química - Universidad Nacional del Sur*
[3] *Universidad Tecnologica Nacional*

El flúor (F) en concentraciones superiores a 1.7 mg/L[1] puede provocar fluorosis dental y ósea, así como daño neurológico entre otros importantes problemas de salud[2]. La ingesta de éste elemento se vuelve problemática en zonas endémicas de alta concentración en el agua de bebida. El propósito del presente trabajo es estudiar superficies estables de TiO2 en sus estructuras anatasa y rutilo como posibles materiales adsorbentes para la remoción de dicho ion. Los resultados basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT) fueron obtenidos empleando el código VASP utilizando una base de ondas planas y condiciones periódicas. Se estudió la adsorción de NaF sobre la superficie de anatasa con y sin presencia de agua. Al adicionar NaF y dos moléculas de agua para simular disolución acuosa se observa que el átomo de F se adsorbe sobre un átomo de Ti insaturado pentacoordinado en la superficie de TiO2(110) de rutilo, mientras que ocupa un sitio intersticial en la superficie de TiO2(101) correspondiente a la anatasa. Es interesante destacar que en el caso de fluoruro de sodio en anatasa sin la presencia de agua (NaF/A) la hibridación entre el átomo de F y el Ti se produce en la banda de conducción (BC) asociado a un valor de orden de enlace (BO) despreciable, indicando que la unión no es enlazante. Diferente es la situación para el polimorfo rutilo (NaF/R) que presenta para el átomo de flúor y el Ti más próximo una hibridación interesante en la banda de valencia (BV) acompañada de un valor de BO importante. La presencia de H2O en ambos sistemas permite observar que para el caso de anatasa (NaF-2H2O/A) la hibridación se produce en la BV pero entre el átomo de flúor intersticial y los átomos de oxígenos cercanos, mientras que para rutilo (NaF-2H2O/R) la interacción enlazante se produce en la misma banda pero entre el F y los Ti aledaños de la superficie.

Referencias:

[1] Tor A., Danaoglu N., Arslan G., and Cengeloglu Y., J. Hazard. Mater. **164**, 271 (2009).
[2] Tang Y., Guan X., WangJ., Gao N., McPhail M., and Chusuei C., J. Hazard. Mater. **171**, 774 (2009).

Generación de señales eléctricas arbitrarias usando el efecto Josephson para aplicación en Metrología

• José Daniel Pinto Zárate,[1,2] Mariano Real,[2] Ricardo Iuzzolino[2]

[1] *Departamento de Fisica, FCEyN, UBA*
[2] *Instituto Nacional de Tecnología Industrial*

El continuo avance de la instrumentación electrónica demanda calibraciones cada vez más exactas y precisas. En especial los instrumentos generadores de señales permiten obtener señales arbitrarias con un amplio rango de amplitud y frecuencia, demandando cada vez mayor exactitud en la calibración. Es en este sentido que en los institutos de Metrología se esta llevando a tener trazabilidad directa a las unidades de tensión eléctrica, conforme al nuevo Sistema internacional de Unidades, SI, el cual refiere las unidades de base a constantes fundamentales.
Por ende, se esta investigando continuamente en tener patrones cuánticos para la mayoría de las unidades, los ejemplos mas comunes son los sistemas Josephson basados en el efecto Josephson para tensión eléctrica, en el cual la tensión generada depende de constantes fundamentales: la constante de Planck, la carga eléctrica elemental y una frecuencia enlazada a los relojes atómicos.
Estos sistemas utilizan arreglos de miles de junturas Josephson, en este trabajo usaremos el arreglo de junturas Josephson que serán irradiadas por un tren de pulsos de tiempo corto con un patrón de repetición determinado por el tipo de señal que se quiere obtener.
A estos sistemas se los conoce como Josephson Arbitrary Waveform Synthetizer (JAWS), en el cual se usan junturas Josephson SNS (superconductor-normal-superconductor) conectadas en serie y que trabaja a 4.2 K.
La señal de tensión generada por este sistema se logra a partir de la entrada de pulsos binarios de corriente, donde existe un patrón específico de pulsos para cada señal que se quiera generar, y el mismo se obtiene mediante algoritmos de modulación Sigma-Delta.
En este trabajo se realizaron y comprobaron numéricamente distintos patrones de pulsos utilizando estas técnicas, se presentarán los resultados obtenidos a partir de las simulaciones y que serán utilizados posteriormente en el sistema JAWS.

Corrección de Imágenes de RMN con artefactos por ruido de fase

• Guillermo Omar Forte,[1,2] Mario Alejandro Garcia,[3] Esteban Anoardo[1,2]

[1] *Laboratorio de Relaxometría y Técnicas Especiales, Grupo de Resonancia magnética Nuclear, FaMAF-UNC e IFEG-CONICET*
[2] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*
[3] *Facultad Regional Cordoba - Universidad Tecnológica Nacional*

En la generación de imágenes a través de Resonancia Magnética Nuclear (MRI, por sus siglas en inglés), en equipos donde se utiliza electroimanes para la generación de campos magnéticos, se presenta la dificultad de estabilizar el campo magnético durante la adquisición de las señales de RMN. Una consecuencia de esta dificultad, es que aparecen variaciones aleatorias de fase entre las señales obtenidas que corresponden a cada linea de la matriz de la imagen en el espacio-k [1]. Esta fuente de ruido por variación de fase, se traduce en la imagen como un artefacto que se presenta como fantasmas en la dirección de codificación de la fase. Diferentes técnicas se han propuesto para corregir esta fuente de ruido presente en MRI, en general todas ellas basadas en la medición de algún parámetro de calidad de la imagen, y luego en la optimización de este parámetro (buscando un extremo de la función de peso correspondiente), en función de un vector de corrección fase. Algunos ejemplos de estas técnicas son [2] y [3], donde se aplica un algoritmo iterativo de optimización. El inconveniente que se presenta con esta manera de resolver el problema, es que la función de peso suele presentar mínimos locales, por lo que el algoritmo de corrección puede, en ciertas circunstancias, arribar a una imagen cuyo parámetro de medición de calidad es mejor, pero sin embargo no se ha logrado corregir el artefacto producido por el ruido de fase. En este trabajo se propone un manera analítica de encontrar un vector de corrección de fase, cuya solución es única y en condiciones ideales podría garantizar la corrección del artefacto que presenta la imagen por ruido de fase. La técnica propuesta se base en la introducción en el espacio de la muestra de un fantoma conocido tomado como referencia, y en base al cual se realizan los cálculos que permite conocer cual es la variación de fase en cada una de las señales de RMN adquiridas, y corregirlas. Se presentan los resultados simulados, y las dificultadas que presenta su implementación práctica.

Referencias:

[1] E. Haacke, R. Brown, M. Thompson, and R. Venkatesan, *Magnetic Resonance Imaging Physical Principles and Sequence Design*, John Wiley Sons, Inc, (1999).
[2] R. Eberhart and J. Kennedy, *A new optimizer using particle swarm theory*, in MHS'95. Proceedings of the Sixth International Symposium on Micro Machine and Human Science, 39 (1995).
[3] H. Chang and J. M. Fitzpatrick, *A technique for accurate magnetic resonance imaging in the presence of field inhomogeneities*, IEEE Trans. Med. Imaging **11**, 319 (1992).

Tomografía de coherencia óptica de rango extendido para aplicaciones industriales

• Leslie Judith Cusato,[1,2] Jorge Román Torga,[1,2] Eneas Nicolás Morel[1,2]

[1] *Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas*
[2] *Grupo de Fotonica Aplicada, Facultad Regional Delta, Universidad Tecnológica Nacional*

En las últimas décadas, dentro del ámbito de los ensayos no destructivos, las técnicas ópticas han ganado gran interés debido a su mayor precisión y sensibilidad. Estas técnicas son utilizadas tanto en ámbitos científicos como industriales para evaluar las propiedades de un material, componente o sistema, sin dañar la muestra bajo estudio. Las áreas de aplicación abarcan desde el control de calidad y el mantenimiento de equipos e instalaciones, hasta la restauración y conservación de patrimonios culturales. A pesar del constante avance de las tecnologías aplicadas, son escasas las técnicas que permitan realizar imágenes por debajo de la superficie del material de manera rápida, no invasiva y sin contacto. Entre los métodos ópticos que buscan suplir estas deficiencias, se destaca la tomografía de coherencia óptica (optical coherence tomography, OCT), ampliamente conocida en el ambiente de la biomedicina. Esta técnica se basa en la interferometría de baja coherencia (LCI) para realizar imágenes de alta resolución en dos o tres dimensiones. La principal limitación en los sistemas convencionales y de bajo costo para su aplicación en ambientes industriales, es el rango de medición acotado a 3 mm o 4 mm. La incorporación de un detector heterodino para la técnica de OCT permite extender el rango de medición hasta al menos 5 cm manteniendo la resolución característica. En este trabajo se muestran distintas configuraciones posibles del detector para optimizar el rango de medición y el costo del equipo. Además se propone una posible aplicación en medición de espesores que permitiría su implementación en línea de producción. Entre las principales ventajas de este equipamiento se destacan su versatilidad y la facilidad de calibración y operación ya que no es necesario un procesamiento posterior de la señal para obtener las mediciones de interés.

Técnicas de caracterización de materiales compuestos reforzados con fibra de vidrio con un shearógrafo basado en un sistema embebido

• Julieta Uicich,[1] Pablo Montemartini,[1,2] Gustavo Arenas[3,4]

[1] *Instituto de Investigaciones en Ciencia y Tecnología de Materiales, CONICET-UNMdP*
[2] *Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Mar del Plata*
[3] *Laboratorio LASER - ICyTE*
[4] *Instituto de Investigaciones Científicas y Tecnológicas en Electrónica*

En los últimos años en el sector petrolero argentino se han incorporado miles de kilómetros de tubería de materiales compuestos reforzados con fibra de vidrio (MCRFV), un ejemplo es YPF que cuenta con más de 6.000 km de tuberías de MCRFV en operación. Inicialmente fueron utilizados en líneas de conducción y en pozos inyectores de campos maduros, y debido a los buenos resultados obtenidos, actualmente ocupan una parte del mercado en yacimientos no convencionales e incluso se expande a la producción de gas. Estas tuberías tienen una vida útil de 20 años durante los cuales el monitoreo debe ser continuo. En condiciones de operación controladas, la vida útil podría extenderse considerablemente o hasta incluso duplicarse.
Independientemente del mecanismo que origine pérdidas de integridad, su detección temprana es crítica para reducir aún más el riesgo ambiental y físico, y para evitar paradas de producción y transporte que pueden ocasionar pérdidas económicas importantes.
El programa de monitoreo de instalaciones en servicio es uno de los requisitos presentes en las buenas prácticas de operación de cualquier empresa; siendo promovidos por los organismos de control estatal. Los programas de monitoreo resultan imprescindibles para disminuir el impacto que generan las fallas catastróficas. La implementación requiere contar con técnicas de inspección que permitan detectar defectos generados durante la operación y/o la fabricación. Los MCRFV representan un gran desafío para la implementación de programas de monitoreo, especialmente debido a la falta de técnicas de inspección consolidadas y aplicables en operación.
La shearografía es una técnica que permite la inspección en tiempo real, no invasiva e inocua, que es utilizada en la industria de MCRFV para el control de calidad de productos nuevos y, en forma incipiente, para la inspección en condiciones de operación. Mediante shearografía se detectan principalmente problemas de delaminación, falta de adhesión, y fisuras. Dentro de las limitaciones de esta técnica se destaca la necesidad de conocer la totalidad de los factores que afectan al sistema bajo análisis y el efecto que cada uno de estos factores posee en el comportamiento del material.
Los resultados que se presentan son parte del trabajo de tesis que se propone ampliar las aplicaciones de la shearografía como técnica general de caracterización de MCRFV. El trabajo incluye el desarrollo de equipamiento portable, adecuado para su uso en condiciones de operación, que permita detectar señales incipientes de daño y degradación.

Comportamiento eléctrico de redes percolativas de nanohilos de plata en polivinilpirrolidona y películas de dióxido de titanio

• Juan Ignacio Diaz Schneider,[1] Levy Pablo,[2,3] Martinez Eduardo David[1,4,5]

[1] *Instituto Balseiro - Universidad Nacional de Cuyo*
[2] *INSTITUTO DE NANOCIENCIA Y NANOTECNOLOGIA -CONICET/CNEA- NODO CONSTITUYENTES*
[3] *Dpto. Materia Condensada, CAC, CNEA*
[4] *Instituto de Nanociencia y Nanotecnología, CNEA, CONICET, Centro Atómico Bariloche, Av. Bustillo 9500 (8400) S. C. Bariloche, Argentina.*
[5] *Centro Atomico Bariloche - Comisión Nacional de Energía Atómica*

La implementación de Redes Neuronales Artificiales mediante sistemas electrónicos tradicionales, basados en lógica booleana, ha logrado avances inimaginables en tareas de identificación, clasificación y organización de datos, encontrándose en auge su desarrollo. Sin embargo, el desempeño en cuanto al procesamiento de información, la capacidad de aprendizaje y el consumo energético es muy inferior respecto a los sistemas biológicos. Por este motivo, el desarrollo de nuevas tecnologías que imiten propiedades neuronales resulta imprescindible.
Los memristores son dispositivos eléctricos pasivos de dos terminales que constituyen una resistencia multivaluada con memoria capaces de emular el comportamiento sináptico del cerebro. Este proyecto tiene como objetivo desarrollar dispositivos neuromórficos mediante la fabricación y caracterización de sistemas nanocompuestos formados por nanohilos de plata (AgNWs) en polivinilpirrolidona (PVP) y películas de dióxido de titanio (TiO2) con propiedades eléctricas memristivas.
Para fabricar los sistemas, se utilizaron AgNWs recubiertos por PVP sintetizados por el método poliol y dispersados empleando Spin-Coating, y películas de TiO2 crecidas por método Sol-Gel a partir de tetraisopropóxido de titanio. Para caracterizar el sistema fueron formados electrodos de plata utilizando técnicas de microfabricación. Se estudió el comportamiento eléctrico de una red de AgNWs en función del grado de cobertura. Se obtuvo la curva de percolación eléctrica como función de la fracción de llenado, y se observaron propiedades memristivas. Por otro lado, se fabricó y caracterizó un nanocompuesto formado por una red de AgNWs en una matriz de TiO2 . Se presentarán resultados de su caracterización eléctrica.

Palabras Clave: Memristor, Neuromórfico, Sol-Gel, Nanohilos

Producción y caracterización de biocarbones activados generados a partir de desechos de la industria cervecera

• Sofía Raviolo,[1] Guillermina L. Luque,[2] Marcos I. Oliva[1,3]

[1] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*
[2] *Instituto de Investigaciones Físico-Químicas de Córdoba, CONICET-UNC*
[3] *Grupo de Ciencia de Materiales FaMAF, IFEG CONICET*

En las últimas décadas, el estudio de diversos carbones activados (C.A.) ha sido de gran interés debido a su multiplicidad de aplicaciones en diferentes áreas. En especial, ha llamado la atención debido a las posibles soluciones que conlleva para la actual crisis climática y energética, a causa de su utilidad en, por ejemplo, el almacenamiento de hidrógeno [1], celdas solares [2], la absorción de dióxido de carbono [3], el tratamiento de aguas contaminadas [4], entre otras. Así mismo, en los últimos años se han realizado numerosos esfuerzos para reemplazar los carbones convencionales (provenientes en su mayoría de fuentes fósiles) por biocarbones obtenidos a partir de distintas fuentes de biomasa [5-7]. Estos biocarbones cuentan con la ventaja de provenir de fuentes renovables y abundantes en el planeta, y pueden además obtenerse de desechos industriales, con lo cual se revaloriza y utiliza un residuo. Es en este marco que hemos decidido poner nuestro foco de estudio en los biocarbones activados provenientes de los granos que forman parte del residuo de la industria cervecera (BSG, por sus siglas en inglés: brewer's spent grains). Este desecho representa aproximadamente el 85% del subproducto total del proceso de elaboración de la cerveza con una producción mundial anual de 30 106 toneladas [8]. Por lo que sería de gran importancia e impacto poder dar un aprovechamiento a este residuo. En este trabajo nos hemos enfocado en la producción y caracterización de biocarbones proveniente de BSG activados en distintas condiciones. Para esto, se realizó un estudio detallado, variando los distintos parámetros que intervienen en el proceso de activación con KOH con el objetivo de optimizar el área de los carbones obtenidos. La morfología de los carbones fue caracterizada mediante el microscopio de barrido electrónico, en donde se pueden observar las diferentes estructuras que adopta el material carbonoso en función del proceso de activación. Las muestras también se caracterizaron mediante espectroscopía Raman y difracción de rayos X para comparar el grado de grafitización de las mismas y evaluar la presencia de otros materiales dentro de la estructura carbonosa. Así mismo, se realizaron isotermas de adsorción de N2 con las cuales se obtuvieron las distintas áreas superficiales y las distribuciones de diámetro de poro.

Referencias:

[1] WANG, Huanlei, GAO, Qiuming, and HU, Juan. *High hydrogen storage capacity of porous carbons prepared by using activated carbon*. J. Am. Chem. Soc. **131**, 7016 (2009).

[2] IMOTO, Kiyoaki, *et al.*, *Activated carbon counter electrode for dye-sensitized solar cell*. Electrochemistry **71**, 944 (2003).

[3] SHAFEEYAN, Mohammad Saleh, *et al.*, *A review on surface modification of activated carbon for carbon dioxide adsorption*. J. Anal. Appl. Pyrolysis **89**, 143 (2010).

[4] BHATNAGAR, Amit, *et al.*, *An overview of the modification methods of activated carbon for its water treatment applications*. Chem. Eng. J. **219**, 499 (2013).

[5] ZHAO, W., *et al.*, *Synthesis and characterization of Pt-N-doped activated biocarbon composites for hydrogen storage*. Composites Part B: Engineering **161**, 464 (2019).

[6] BRITO, Gilberto Maia, *et al.*, *High-performance of activated biocarbon based on agricultural biomass waste applied for 2, 4-D herbicide removing from water: adsorption, kinetic and thermodynamic assessments*. J. Environ. Sci. Health B **55**, 767 (2020).

[7] WANG, Fangping, *et al.*, *MoS2/corncob-derived activated carbon for supercapacitor application*. Mater. Chem. Phys. **244**, 122215 (2020).

[8] K. Vanreppelen, S. Vanderheyden, T. Kuppens, S. Schreurs, J. Yperman, and R. Carleer, *Activated*

carbon from pyrolysis of brewer's spent grain: production and adsorption properties, Waste Manage. Res. **32**, 634 (2014).

Estudio de contactos transparentes de SnO_2:F para aplicación en celdas solares

• Sergio Woloj,[1,2] Aneely Carrero,[3,4] Daniel Rodríguez,[5] Carlos Lasorsa,[2] Marcela Patricia Barrera[3,4]

[1] *Centro Atómico Constituyentes, Comisión Nacional de Energía Atómica*
[2] *Facultad Regional Haedo - Universidad Tecnológica Nacional*
[3] *INSTITUTO DE NANOCIENCIA Y NANOTECNOLOGIA -CONICET/CNEA- NODO CONSTITUYENTES*
[4] *Departamento Energía Solar, CNEA*
[5] *Departamento de Micro y Nanotecnología - Centro Atómico Constituyentes - Comisión Nacional de Energía Atómica*

Los dispositivos fotovoltaicos o celdas solares se utilizan para la provisión de energía eléctrica en aplicaciones tanto terrestres como espaciales. Las celdas solares convencionales poseen un contacto en forma de grilla metálica que cubre parcialmente la cara frontal del dispositivo. Los contactos de una celda solar deben cumplir con ciertos requisitos, tales como ser óhmicos, tener baja resistencia de contacto con el sustrato y una baja resistencia serie. En este trabajo se busca mejorar los parámetros eléctricos de las celdas solares de silicio y de semiconductores III-V, como por ejemplo la corriente de cortocircuito y la eficiencia. Esto se puede lograr utilizando como contactos estructuras conductoras transparentes, permitiendo de este modo que la luz solar incida sobre toda la superficie del dispositivo. Se trabajó en la puesta a punto del proceso de depósito de películas conductoras transparentes de SnO_2:F a través de la técnica de spray pirolisis. En una primera etapa se depositaron capas de este material sobre vidrio y se espera en el futuro realizar las primeras pruebas sobre Si y sobre semiconductores III-V. Se muestran los primeros resultados de la caracterización óptica y estructural de las muestras.

Contacto: woloj@tandar.cnea.gov.ar, carrero@tandar.cnea.gov.ar, rdrodrig@cnea.gov.ar, clasorsa@frh.utn.edu.ar, barrera@tandar.cnea.gov.ar

Celdas solares para usos espaciales nivel laboratorio hacia la transferencia de tecnología

• Simón Saint André,[1,2] Javier Garcia,[2] Marcela Patricia Barrera[1,2]

[1] *INSTITUTO DE NANOCIENCIA Y NANOTECNOLOGIA -CONICET/CNEA- NODO CONSTITUYENTES*
[2] *Departamento Energía Solar, CNEA*

Las celdas solares basadas en semiconductores III-V poseen una eficiencia que, en el caso de multijunturas, supera el 30 % a nivel laboratorio. Esta característica, sumada a su alta resistencia a la radiación, las hace aptas para aplicaciones espaciales, donde la demanda de potencia eléctrica y la escasa superficie disponible son parámetros de importancia. Otro material relevante es el Ge, que debido a su band gap, es utilizado en celdas de triple juntura InGaP-GaAs-Ge para absorber la porción del espectro solar correspondiente al infrarrojo medio. Esta última cualidad hace también que se utilice en monojunturas en aplicaciones donde el manejo térmico toma relevancia. Resulta de importancia entonces diseñar y estudiar celdas solares basadas en semiconductores III-V y Ge así como también estudiar sus propiedades físicas y comportamiento eléctrico. Se presentan algunos resultados obtenidos en los últimos años en cuanto al estudio de películas antirreflectantes, simulación numérica de dispositivos y primeros pasos en la fabricación. Todo el trabajo tiene como finalidad lograr un aprendizaje que conduzca hacia la transferencia de tecnología de celdas y paneles solares para satélites a nivel regional. Como ejemplo se muestran algunas aplicaciones del uso de los dispositivos en pequeños satélites surgidas de la vinculación tecnológica con una *start up* del sector espacial.

Contacto: saintand@tandar.cnea.gov.ar, jgarcia@tandar.cnea.gov.ar, barrera@tandar.cnea.gov.ar

Desarrollo de un sistema para la detección de señales en coincidencia basado en tecnología FPGA

• Matías Rubén Bolaños,[1] Lorena Rebón,[1,2] Fabián Videla[1,3]

[1] *Centro de Investigaciones Ópticas (CIOp - CONICET - UNLP - CICPBA)*
[2] *Instituto de Física de La Plata, CONICET*
[3] *Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata*

En este trabajo se diseñó e implementó un sistema autónomo y reconfigurable para conteo de pulsos temporalmente correlacionados, basado en un arreglo de compuertas lógicas programables (FPGA) [referenciaTesis]. Este módulo de coincidencias es uno de los componentes fundamentales para aplicaciones de información cuántica y comunicación cuántica con fotones, en donde el sistema de detección consta de fotodiodos de avalancha (APDs) trabajando en modo Geiger. El módulo desarrollado permite el conteo de pulsos individuales provenientes de cuatro entradas independientes, al mismo tiempo que es capaz de contar coincidencias múltiples de dos, tres y cuatro fotones, dentro de ventanas temporales variables. Adicionalmente se programaron, en la misma FPGA, módulos accesorios para la caracterización funcional del dispositivo desarrollado en forma agnóstica del experimento, ya que los mismos nos permiten generar señales electrónicas con propiedades estadísticas definidas por el usuario capaces de simular el arribo de señales provenientes de un experimento real. Para esto se implementó un circuito generador de números pseudoaleatorios con ayuda del cual se simularon tres tipos fuentes ópticas con distinta estadística de fotodetección: láser, térmica y de fotones individuales (estados de Fock de n fotones). Para cada una de las fuentes implementadas se simuló, íntegramente en la placa de desarrollo, el experimento de Hanbury-Brown y Twiss sin retardos, y se obtuvo la función de correlación de segundo orden, que da cuenta de la estadística de la fuente. El desarrollo se completó con una interfaz gráfica que permite controlar los parámetros de detección de cada experimento y observar los resultados en tiempo real.

Fotoluminiscencia y Actividad Speckle en capas delgadas semiconductoras para optoelectrónica

• Luis Ezequiel Moringo,[1] Diego Richard,[2] Pablo Vaveliuk,[1,3] Matías Rubén Tejerina[2]

[1] *Instituto de Ingeniería y Agronomía, Universidad Nacional Arturo Jauretche*
[2] *Centro de Tecnologías de Recursos Minerales y Cerámica, CONICET*
[3] *Centro de Investigaciones Ópticas, CONICET La Plata - CIC-BA*

El ZnO y el NiO son semiconductores del grupo II-VI tipo-n y del grupo VII-VI tipo-p, respectivamente. Ambos semiconductores tienen un elevado gap óptico. Los recubrimientos de óxido de zinc dopados o en aleación con metales de transición tiene múltiples aplicaciones como piezoeléctricos, transductores, guías de onda ópticas, electrodos transparentes, celdas solares y diodos [1,2]. En este trabajo presentamos una caracterización de recubrimientos ZnO/NiO fabricados por sol-gel spray-pyrolysis. Esta técnica consiste en pulverizar una solución que contiene el ion base sobre un sustrato que se mantiene a elevada temperatura. Si bien el proceso posee algunas dificultades intrínsecas para lograr recubrimientos de baja porosidad (menor al 5 por ciento) por la formación de gotas, el mismo es de especial interés ya que permite escalar el proceso a grandes áreas (mayores a 30 cmxcm) y a bajo costo debido a la simplicidad del montaje y a que puede operar a presión atmosférica. Se obtuvieron capas de considerable porosidad y se correlacionó la actividad speckle con su espesor para distintas composiciones, Además, se caracterizaron empleando las técnicas Difracción de Rayos X, fotoluminiscencia y Transmitancia.

Referencias:

[1] Herissi, L., L. Hadjeris,M.S. Aida,S. Azizi,A. Hafdallah, andA. Ferdi, Nano Hybrids and Composites **27**, 21 (2019).
[2] Brinker, C. F., and Hurd A., J. Phys. III **4**, 1231 (1994).

Reconocimiento de objetos basados en lidar e imágenes digitales

• Nicolás Urbano Pintos,[1,2] Héctor Alberto Lacomi,[1] Cristian Donato,[1] Mario Blas Lavorato[2]

[1] *CITEDEF, Laboratorio Radar Láser*
[2] *Grupo TAMA - Universidad Tecnológica Nacional - Facultad Regional Haedo*

El sistema LIDAR propuesto está basado en el principio de Tiempo de Vuelo (ToF – Time of Flight), donde se emite un pulso láser colimado hacia un objetivo, el haz de luz se refleja difusamente en el mismo, para luego ser detectado por un receptor, que convierte la luz en un pulso eléctrico. El tiempo que transcurre entre la emisión y la recepción, relacionado con la velocidad de la luz permite obtener la distancia al objeto [1]. El LIDAR se montará en un sistema mecánico para realizar un barrido y obtener un mapa del entorno que lo rodea, denominado nube de Puntos. En cuanto a la electrónica asociada al dispositivo, se contempla un emisor láser de 905nm (OSRAM SPL PL90-3) [2], una fuente de corriente pulsada [3], un fotodiodo de disparo (OSRAM SFH2701), un receptor formado por un fotodiodo (IDEM disparo), y un amplificador TIA en conjunto con un amplificador diferencial. La señal se digitaliza a través del ADC (10bits 80MS/s) construido por el Laboratorio Radar Láser. El control del dispositivo y el procesamiento de la señal LIDAR se realizará con una FPGA-SOC con Linux embebido [4]. La información de la Nube de punto se sumará a la obtenida por una cámara digital, y serán las entradas de un algoritmo de aprendizaje automático para la clasificación y detección de objetos, de modo de compensar la información provista por la cámara, cómo la forma del objeto, el color, y textura; con la información obtenida del LIDAR, como la profundidad de campo, que además de brindar distancia suple la sensibilidad de la cámara a la iluminación.

Palablar Clave: LIDAR; ToF; Reconocimiento de Objetos; FPGA-SOC; Aprendizaje Automático

Referencias:

[1] J. Liu, Q. Sun, Z. Fan, and Y. Jia, *TOF Lidar Development in Autonomous Vehicle*, IEEE 3rd Optoelectronics Global Conference (OGC), (2018).
[2] Radial T1 3/4, SPL PL90 — OSRAM Opto Semiconductors
[3] TIDA-01573 Nanosecond Laser Driver Reference Design for LiDAR — TI.com
[4] Lacomi, H. A., Fiore, T. A. Di, Larosa, F., and Pintos, N. U. *Sistema de adquisición reconfigurable para detección de señales Lidar basado en FPGA*. CASE 2020, 2020.

Unidad portátil para la medición de radiación ultravioleta acoplado a un "smartphone"

• Nicolás Urbano Pintos,[1] Mario Blas Lavorato[1]

[1] *Grupo TAMA - Universidad Tecnológica Nacional - Facultad Regional Haedo*

Se presenta el desarrollo de una unidad portátil de medición de Radiación UV (UV Index) alimentado con baterías. La unidad cuenta con un sistema óptico de posicionamiento solar operado manualmente, una serie de sensores de presión, temperatura y radiación UV, un reloj de tiempo real y un microcontrolador tipo Arduino para el manejo de datos. La unidad adquiere por segundo, valores instantáneos de radiación UV, presión y temperatura acompañados con la fecha y hora de adquisición. Al microcontrolador se le anexó una unidad Bluetooth para la comunicación y envío de datos a un sistema informático externo tipo Smartphone, Tablet o PC. Este equipo compacto no tendrá display de visualización ni unidad de registro en memoria y fue pensado para realizar las mediciones de variables atmosféricas in-situ, en cualquier lugar y en cualquier momento. Se muestra la operación con un Smartphone para el registro y visualización de datos. La unidad portátil fue desarrollada pensando, en particular, que la adquisición se realice utilizando un teléfono celular tipo Smartphone instalando una aplicación específica que se desarrolló para tal fin.

Paralbras Clave: Radiación UV, Microcontroladores, Temperatura, Bluetooth, Smartphone.

Selección de un protocolo de "Power Line Communications" aplicado a un aerogenerador opera bajo condiciones climáticas severas

• Laura Ibarreta Fañanas,[1] Mario Blas Lavorato[2]

[1] *Grupo UTN-GATIIR - Universidad Teconlógica Nacional - Facultad Regional Santa Cruz*
[2] *Grupo TAMA - Universidad Tecnológica Nacional - Facultad Regional Haedo*

En este trabajo, se presenta el estudio preliminar para la selección de uno o más protocolos (o estándares) de comunicación utilizando la técnica PLC (Power Line Communications). La preselección de uno de estos protocolos permitirá optimizar la comunicación 'full-duplex' entre un aerogenerador y una vivienda o centro de control alimentado por esta misma unidad generadora. Este sistema complejo de alimentación y control, cuenta con la peculiaridad de que el mencionado aerogenerador se encuentra ubicado en una zona remota de la Patagonia Austral, trabajando bajo condiciones climáticas severas y lejos de los grandes centros urbanos.

Palabras Clave: PLC, full-duplex, Protocolos, Aerogenerador, Patagonia Austral.

Dimensionamiento de componentes para sistema energético autónomo de uso rural en paraje de la provincia de Catamarca

• Pablo Nicolás Konverski,[1] Raul Guillermo Ortega,[2] Jose Eduardo Nieva,[2] M D Cabezas,[3] Hector J. Fasoli[2,4]

[1] *Dep. Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Catamarca*
[2] *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad Nacional de Catamarca*
[3] *Instituto de Investigaciones Científicas y Técnicas para la Defensa*
[4] *Facultad de Ingeniería y Ciencias Agrarias, Pontificia Universidad Católica Argentina*

Los sistemas energéticos autónomos están pensados para abastecer con potencia eléctrica las diferentes tecnologías destinadas a mejorar la vida diaria y quehacer de los usuarios que se encuentran alejados del Sistema Argentino de Interconexión (SADI). Con la intención de definir un sistema de generación hibrido con el que satisfacer los requerimientos en una vivienda rural con prestaciones similares a las disponibles en zonas urbanas, se dimensionan los componentes para un sistema de generación eléctrica no abastecido con fuentes no renovables, utilizando las tecnologías maduras de paneles fotovoltaicos y aerogeneradores incorporando stacks de celdas de combustibles (PEM) a hidrógeno generado y almacenado in situ. Habiendo obtenido resultados (expuestos en RAFA 105) que establecen al vector hidrógeno no solo como acumulador energético sino como elemento estabilizador, cuyo propósito es resolver los inconvenientes que las energías renovables presentan en su previsibilidad; en este estudio se aborda el dimensionamiento de las tecnologías requeridas para el funcionamiento de un sistema energético simple, tomando como referencia consumos promedio de la región, con la finalidad de evaluar el número y capacidades de potencia requeridas por los dispositivos constituyentes del sistema energético autónomo, para su aplicación en un paraje de la provincia de Catamarca, considerando condiciones climáticas locales.

Internet de la Cosas (IoT) aplicado a un desarrollo sustentable

• Ricardo Vecchio,[1] Diego Alejandro Lazcano Colodrero[1]

[1] *Facultad de Ingeniería y Tecnología Informática, Universidad de Belgrano*

La evolución que hemos visto durante la era de la Información trajo a nuestras vidas Internet, y con ella, un sinfín de aplicaciones que fueron pasando por distintos ámbitos hasta llegar a lo que hoy se conoce como Internet de las cosas IoT (por las siglas en inglés de Internet of Things). El concepto de IoT es que cualquier entidad que produzca información puede compartirla y permite accionar en consecuencia, en forma de alertas tempranas o en forma de acciones directas sobre el objeto o el proceso en cuestión, luego del análisis y toma de decisiones ejecutado en la infraestructura IoT en la nube sobre la base de la información enviada y recibida. Ya en noviembre de 2015 la consultora especializada Gartner expresó que solo en el 2016 existirán 6400 millones de objetos conectados y que para el 2020 existirán 20800 millones, con un crecimiento durante 2016 a razón de 5,5 millones de dispositivos nuevos conectados por día. La evolución de los últimos años en lo que refiere a "Cloud Computing, Big Data" y avances como capacidad de procesamiento y sensores, han transformado una parte de Internet en algo que hemos dado en llamar Internet de las Cosas (IoT) que es el ámbito donde estos elementos encuentran interacción entre sus distintos conjuntos. Sin embargo, la posibilidad de conectar cosas y emitir mensajes ante ciertas variables, es relativamente conocido y explotado bajo el nombre de M2M (Machine to Machine) y muchas veces se tiende a pensar que M2M es IoT. En cambio, IoT procesa en instancias superiores cantidades de información masivas para predecir evoluciones o tomar decisiones determinadas basadas en la salida del modelo o proceso en cuestión. Los ecosistemas de IoT comprenden muchas aristas que hacen fundamental su entendimiento para un correcto uso del mismo. El estado actual de IoT y su ecosistema cambian rápidamente debido principalmente al gran avance en cada una de las partes que lo forman, aunque existen direcciones de desarrollo bien marcadas y definidas. Por lo presentado en los párrafos previos, creemos fundamental el estudio del ecosistema de IoT con aplicaciones a un desarrollo sustentable. Los objetivos principales del proyecto son desarrollar capacidades dentro de la Universidad en el ámbito de Internet de las Cosas, además proporcionar a las cátedras tradicionales las herramientas provenientes del campo de la ingeniería electrónica y las telecomunicaciones. Además investigar los protocolos de comunicaciones involucrados en IoT y el hardware necesario y su uso y elección en función de la solución adecuada. También investigar sensores disponibles en el mercado en vías de propuestas innovadoras de aplicaciones de IoT como así también promover y divulgar las investigaciones y desarrollos de las nuevas tecnologías y la IoT. El presente desarrollo experimental apuntará específicamente a la telemedición y el telecontrol de distintos orquidearios basado en un esquema IoT, utilizando ThingSpeak (Matlab) como servicio de análisis de datos en la nube para aplicaciones IoT, como hardware local una placa de la familia arduino mas un hardware dragino Yun Shield y además un grupo de sensores locales adecuados para esta aplicación.

Aproximación teórica al dimensionamiento del tamaño de lote con deterioro

• Margarita Miguelina Mieras,[1] Tania Daiana Tobares,[1] Lautaro Urquiza,[1] Camila Cramero,[1] Marina Amaya Holgado,[1] Maria Eugenia Giaroli,[1] Paula Bustos Buenanueva,[1] Fabricio Orlando Sanchez Varretti,[1] Antonio José Ramirez Pastor[2]

[1] *Facultad Regional San Rafael - Universidad Tecnológica Nacional*
[2] *Instituto de Física Aplicada,CONICET-UNSL*

Las empresas y organizaciones de diversos tipos se plantean la necesidad de reducir desperdicios y aumentar los beneficios además de ser sustentables en el medio donde se desempeñan. Esto ha llevado a que se haga hincapié en las actividades logísticas para lograr estos objetivos. Dentro de estas actividades se halla la gestión de inventario como una alternativa para disminuir los costos de las organizaciones, a través de una mejor administración de los materiales almacenados y su transporte. El Dimensionamiento de Lotes dentro de la Planificación de Requerimientos de Materiales uno de los sistemas que permite planificar cuánto y cuándo debe llevarse a cabo el aprovisionamiento. En este trabajo presentamos un modelo teórico de aprovisionamiento que contempla la posibilidad del deterioro temporal de los insumos a la vez que determina el tamaño óptimo del lote de pedido.

Estación Agro-Meteorológica

• Ricardo Vecchio,[1] Diego Alejandro Lazcano Colodrero[1]

[1] *Facultad de Ingeniería y Tecnología Informática, Universidad de Belgrano*

El objetivo concreto de este desarrollo experimental es lograr en una primera etapa el desarrollo de una estación meteorológica, de manera de poder probar la conectividad del sistema y posteriormente con el agregado de los sensores locales adecuados, una estación agro-meteorológica completa. Este dispositivo brindará servicio meteorológico al área de influencia e información mundial mediante la medición y transmisión de los parámetros medidos localmente a la web OpenWheather (https://openweathermap.org/), integrando de esta manera una estación meteorológica del sistema mundial de la misma. El dispositivo puede replicarse e instalarse en distintas localidades, simplemente cambiando su nombre identificatorio, utilizando el mismo hardware y reconfigurando en el software el nombre de la estación. Este dispositivo, luego de su aceptación, finalmente pasará formalmente a ser una estación meteorológica de la web OpenWheather, logrando lecturas de acuerdo a la calidad de los sensores incorporados a la misma y además un modulo de su software comenzará a calcular la estadística de los valores locales registrados. Posteriormente con el agregado de otros sensores (temperatura del suelo, humedad del suelo, etc.) pasará a conformar una estación agro-meteorológica y también con la facilidad de brindar la información requerida en su área de influencia. El dispositivo desarrollado generará una trama con los valores medidos con el formato requerido (específico y normalizado) para así poder integrar el servicio meteorológico de OpenWeatherMap usando WeatherStations API 3.0. Finalmente cuando las pruebas con el desarrollo arrojen resultados satisfactorios, se procederá a programar módulos de software para realizar las estadísticas locales.

Diseño de fuente de corriente pulsada, compacta y portátil para láseres bombeados por diodo de ND:YVO4

• Nicolás Urbano Pintos,[1,2] Héctor Alberto Lacomi,[2,3] Cristian Donato,[2] Mario Blas Lavorato[1]

[1] *Grupo TAMA - Universidad Tecnológica Nacional - Facultad Regional Haedo*
[2] *CITEDEF, Laboratorio Radar Láser*
[3] *Grupo SyCE - UTN Facutad Regional Haedo*

Se diseñó una fuente de corriente para alimentar un láser pulsado compacto, bombeado por diodo y que opera en 1064nm. La fuente de bombeo es un diodo láser con montaje c-mount de 2W continuos de potencia óptica que emite en la longitud de onda de 808nm. La fuente desarrollada entrega pulsos de hasta 50A pico con un ancho de pulso variable de 15 us a 200 us con una frecuencia de repetición de hasta 1KHz. La misma opera de acuerdo al principio de pulsos rectangulares[1], donde los pulsos de corriente son controlados disparando tanto con el flanco ascendiente como con el descendiente. El circuito se basa en una fuente de tensión en serie con el diodo láser y un transistor tipo MOSFET. El disparo se realiza mediante un pulso de tensión a través de la compuerta del transistor, previo al disparo un capacitor almacenó la carga requerida para emitir el pulso láser, mientras que el capacitor se cargaba a través de la fuente de alimentación [2]. Finalmente se obtiene una salida pulsada con un ancho determinado, el pico de corriente es independiente del ancho del pulso, y se ajusta de acuerdo a la tensión de la fuente. La fuente tiene la ventaja de ser compacta, además tiene la posibilidad de ser alimentada con un banco de baterías ya que posee un bajo consumo en corriente continua, por lo que también resulta ser portable. Para el diseño se seleccionaron componentes que se encuentran en el mercado nacional, como el MOSFET IRF540N y el driver TC4427, estos son componentes relativamente económicos por lo que la fuente resulta ser de bajo costo. Además, el circuito posee un diodo tipo Schottky para evitar los sobre de tensión sobre diodo debido a los pulsos de carga. Se realizaron ensayos con diodos de Si, y diodos Nd:YAG, se comparó el desempeño de la fuente con la placa de evaluación de Texas Instrumen LMG1020EVM-006 [3]. Esta fuente pulsada sumada al láser multipropósito, a los receptores basados en diodo Pin [4], y al ADC operado por FPGA-SOC son parte de un proyecto integral de un LIDAR compacto que se encuentra en desarrollo en la división Radar Láser de CITEDEF.

Palabras Clave: Láser; Driver ; Corriente Pulsada

Referencias:

[1] A. Kilpelä, and J. Kostamovaara, *Laser pulser for a time-of-flight laser radar* Rev. Sci. Instrum. **68**, 2253 (1997).
[2] J. Glaser, *How GaN Power Transistors Drive High-Performance Lidar: Generating ultrafast pulsed power with GaN FETs*, IEEE Power Electronics Magazine **4**, 25 (2017). DOI
[3] A. Doronzo, TIDA-01573 Nanosecond Laser Driver Reference Design for LiDAR, TIDUE52–February 2018.
[4] H. Lacomi, D. M. David de Lima, M. B. Lavorato and C. Arrieta, *Development a new LIDAR detection system operating in 1064 nm with InGaAs technology*, IEEE Biennial Congress of Argentina (ARGENCON) (2016). DOI

Captadores solares innovadores a partir del reaprovechamiento de desechos industriales

• Esteban Mangas,[1] Evangelina Cardillo,[2] Marisa Frechero[3]

[1] *Departamento de Química - Universidad Nacional del Sur*
[2] *INQUISUR – Dpto. de Química – Universidad Nacional del Sur – CIC Pcia. Bs. As.*
[3] *Instituto de Química del Sur-Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Departamento de Química, Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca, Argentina*

El cuidado y la preservación del medio ambiente requiere de diversas metodologías para medir en qué grado la contaminación del hombre lo afecta. El cálculo de la Huella Ecológica y de la Huella de Carbono nos permiten determinar la superficie de tierra que se necesita para absorber todo aquello que producimos, desechamos y el CO2 emitido. En los últimos años se propuso aplicar el modelo de Economía Circular como una alternativa al de la Economía Lineal, dado que enfatiza sobre la reparación, el reciclaje, el reaprovechamiento y la reutilización para la vida sustentable, pero fundamentalmente, considera al residuo como un recurso. Este cambio de paradigma busca poder frenar el daño y mejorar los procesos de producción de bienes y servicios, para transformar los procesos en eficientes, respetuosos, conscientes y creativos. Si a este nuevo paradigma sumamos el uso de energías de fuentes renovables la reducción en el impacto ambiental se potencia. Por todo lo dicho, en este trabajo capitalizamos estos conceptos y conocimientos proponiendo un nuevo método de reaprovechamiento de vidrios de parabrisas de automotores desechados, por su gran calidad en virtud de los estándares de fabricación, y porque estos materiales vítreos no ingresan al circuito de reciclado de los vidrios comunes justamente por sus características. Esta propuesta nos permite postular una disminución en la huella ecológica, de manera individual por cada ser humano que se interese en reaprovechar esos materiales, pero también en toda la población considerando la gran cantidad de parabrisas que son desechados a diario en todo el mundo y que podría dar lugar a un emprendimiento productivo generando un nuevo material y fuentes de trabajo, es decir, un nuevo círculo en economía. Para esto diseñamos un material compuesto formado por una matriz vítrea (vidrio de parabrisas) combinados con micropartículas metálicas que permiten una eficiente captura de la radiación solar la cual es acumulada luego en un reservorio de agua. Los materiales obtenidos se caracterizaron utilizando espectroscopia UV-Vis. Se optimizaron protocolos de fabricación y análisis. Se realizaron ensayos de campo para determinar la eficiencia de la cosecha de energía.

Contacto: esteban mangas@hotmail.com; evangelina.cardillo@uns.edu.ar; frechero@uns.edu.ar

Magnitudes físicas involucradas en la dosimetría en Tomografía Computada (TC) y su relación con los niveles de referencia

• Teresita del Valle Roldan,[1] Edgardo Arguello,[1] Fabian Ausilio,[2] David H Lucero[1]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad Nacional de Catamarca*
[2] *Instituto Medico : La Comunidad*

En la actualidad las organizaciones internacionales recomiendan la optimización en los procedimientos con Tomografía Computada. La Optimización es uno de los Principios fundamentales de la Protección radiológica. La evolución de los equipos de TC dio lugar a la mejora en las imágenes diagnósticas, acompañado de un incremento de las dosis administradas a los pacientes en cada estudio. Se hace imprescindible entonces el balance entre costo (calidad de la imagen) y beneficio para el diagnóstico del paciente, manteniendo las dosis tan razonablemente bajas como sea posible. El primer paso para optimizar es "medir", a fin de tener claramente establecido que estamos haciendo y que queremos "ver". En este trabajo se definen las principales magnitudes que pueden medirse en TC, la dosis absorbida (D), el Indice de dosis en tomografía, CTDI (Computed tomography dose index), el Índice de dosis en tomografía 100 CTDI100 y el Índice de dosis en tomografía ponderado, CTDI low. Siguiendo las recomendaciones del ICRP (International Commission on Radiation Protection), se calcularon los Niveles de referencia para una base de datos de pacientes, encontrándose buena coincidencia con los reportados por la literatura.

Metodología para definir a partir de archivos de espacios de fase esquemas de irradiación para simular planificación en radioterapia

• Ruth Meilij,[1] Egle Aon,[2] Mauro Valente[3,4,5,6]

[1] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*
[2] *Instituto Médico Deán Funes, Córdoba; Argentina*
[3] *Departamento de Ciencias Físicas - Universidad de La Frontera, Temuco, Chile*
[4] *Centro de excelencia en Física e Ingeniería en Salud (CFIS) - Universidad de La Frontera, Temuco; Chile*
[5] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*
[6] *Laboratorio de Investigación e Instrumentación en Física Aplicada a la Medicina e Imágenes de Rayos X, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina.*

Los tratamientos de radioterapia involucran diferentes etapas, desde la adquisición de información del paciente por medios no invasivos como tomografía computada o resonancia magnética, hasta la administración del tratamiento y posterior seguimiento. El volumen que debe ser tratado (Planning Treatment Volume, PTV), junto a los órganos y estructuras en riesgos Organ at Risk, OAR aledaños son identificados por parte de especialista radio-oncólogo, para proceder, con asistencia del Treatment planning System, TPS, con la planificación del tratamiento para obtener diferentes alternativas de abordaje; entre las que se decide el esquema definitivo que será utilizado para el tratamiento. La radiocirugía estereotáctica representa una de las técnicas más precisas y clínicamente eficientes para el tratamiento hipofraccionado. Para las técnicas modernas de radioterapia, el complejo proceso de planificación se realiza utilizando herramientas informáticas que determinan la distribución espacial de dosis correspondiente a diferentes alternativas, o esquemas, de irradiación para proveer, por medio de procesos de optimización, una opción viable capaz de satisface los requerimientos clínicos y físicos propios de cada caso. En este contexto, los modelos involucrados en el cálculo del transporte de radiación resultan determinantes tanto en la precisión como en la velocidad de cómputo.
El presente trabajo reporta la metodología desarrollada para calcular distribuciones espaciales de dosis correspondientes a irradiaciones estereotácticas utilizando simulación Monte Carlo para realizar el transporte de radiación e incorporando el esquema de irradiación, representativo de la planificación, por medio de archivos de espacio de fase. La metodología se implementó en el código FLUKA y se verificó en casos clínicos utilizando información anatómica y demarcación de PTV y OAR y correspondiente esquema de irradiación obtenido de TPS comercial. Los resultados preliminares obtenidos de la primera fase del proceso, destinada a incorporar esquemas simples, confirman la factibilidad de la metodología propuesta e indican una performance promisoria para un cálculo alternativo o independiente de distribuciones espaciales de dosis en irradiaciones estereotácticas.

Efecto de la incorporación de cobre en la respuesta a Rayos X en dosímetros poliméricos en gel

• Alexis Wolfel,[1,2,3] Ignacio Scarinci,[1,2] Pedro Pérez,[1,2] Facundo Mattea,[1,3,4] Mauro Valente[1,2,5]

[1] *Laboratorio de Investigación e Instrumentación en Física Aplicada a la Medicina e Imágenes por Rayos X (LIIFAMIRx) - FAMAF - Universidad Nacional de Córdoba, Argentina.*
[2] *Instituto de Física Enrique Gaviola (IFEG) - CONICET, Córdoba, Argentina.*
[3] *Dpto. de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina.*
[4] *Instituto de Investigación y Desarrollo en Ingeniería de Procesos y Química Aplicada (IPQA), CONICET, Córdoba, Argentina*
[5] *Centro de excelencia en Física e Ingeniería en Salud (CFIS) y Dpto. de Ciencias Físicas - Universidad de la Frontera, 811230 Temuco; Chile.*

La radiación ionizante cumple un papel muy importante en aplicaciones industriales y biomédicas. En particular, la radioterapia es ampliamente utilizada en el tratamiento del cáncer, gracias a su capacidad de entregar altas dosis de radiación en tejidos tumorales, controladas con mucha precisión a nivel espacial. Junto con el avance en el control espacial de la deposición de dosis en tejidos, se requiere que se implementen dispositivos dosimétricos que permitan caracterizar la cantidad y distribución de la radiación absorbida. Los dosímetros de gel polimérico (PGDs), se presentan como materiales sensibles y tejido-equivalentes frente a la radiación ionizante. Los PGDs permiten realizar la cuantificación de la dosis absorbida por el material y evaluar la distribución espacial de la misma. Sin embargo, es necesario optimizar la sensibilidad de los PGDs a la radiación, como también sus técnicas de caracterización, para lograr mayor estabilidad y resolución espacial de la respuesta dosimétrica [1]. En este trabajo se propone que la incorporación de agentes de cobre (Cu) podría utilizarse como una herramienta para mejorar la respuesta a la dosis en PGDs. En un sentido hipotético, por un lado, la presencia de átomos de cobre en la formulación podría generar un refuerzo de la dosis local mediante la emisión de electrones secundarios. Por lo tanto, podría generarse un realce de dosis, que permita detectar la absorción de dosis bajas. Por otro lado, la posible formación de iones Cu^{2+} en el medio, como consecuencia de la absorción de la radiación ionizante, podría ser aprovechada para generar uniones químicas que incrementen la respuesta óptica de los dosímetros. La formación de enlaces químicos entre los iones Cu^{2+} y determinados grupos funcionales orgánicos (ligandos) puede generar complejos organo-metálicos altamente coloreados. El cambio de color puede ser caracterizado y asociado a la respuesta dosimétrica [2]. En este trabajo, se estudiaron los efectos a nivel radiológico provocados por la presencia de Cu en PGDs basados en el monómero *N*-isopropilacrilamida (NIPAm). El estudio se realizó mediante simulaciones de Monte Carlo utilizando el código FLUKA [3]. Se utilizó una composición estándar de dosímetros de NIPAm (89 % m/m agua; 3 % m/m NIPAm; 3 % m/m *N,N'*-metilenbisacrilamida; 5 % m/m gelatina) con un incremento gradual (0,1 % m/m) de Cu (0-1,5 % m/m); Los PGDs se irradiaron en condiciones equivalentes a las experimentales [2], empleando un espectro de fuente definido experimentalmente (W-44kVp). El incremento en la concentración de Cu provocó un aumento proporcional de la dosis de rayos-X depositada en la región irradiada, respecto de la observada en agua, en PGDs con concentraciones de Cu mayores a 0,2 % m/m. El aumento en la dosis depositada fue mayor al 20 % en el centro de la celda dosimétrica en PGDs con Cu 1,5 % m/m. Los valores obtenidos refuerzan la hipótesis de que el Cu puede generar un realce de dosis significativo en los PGDs. Asimismo, se observó que concentraciones bajas de Cu, menores a 0,4 % m/m, presentan una agua-equivalencia del 4,8 % dentro del rango energético típico de radiodiagnóstico, en términos a la respuesta dosimétrica.

Referencias:

[1] Baldock, C. and De Deene, Y. Phys Med Biol. **55**, 1 (2010). DOI
[2] Wolfel, A. *et al.*, Radiat. Phys. Chem. **180** (2021). DOI
[3] Battistoni, G. *et. al.* Front. Oncol. **6**, 116 (2016). DOI

Dosimetría Interna en Tratamientos de Medicina Nuclear: estado de situación en nuestro país y perspectivas en el área de la Física Médica

• Venecia Magalí Calandrón,[1] Paula Cédola,[1] Vanesa María Sanz,[2] Luis Héctor Illanes,[1] Cecilia Yamil Chain[3]

[1] *Departamento de Física, Facultad de Cs. Exactas, Universidad Nacional de La Plata*
[2] *Fundación Centro Diagnóstico Nuclear- CNEA*
[3] *Departamento de Ciencias Biológicas, Facultad de Cs. Exactas, Universidad Nacional de La Plata*

Un radiofármaco es un compuesto radiactivo utilizado para el diagnóstico y tratamiento de enfermedades. La Radioterapia Metabólica (RTM) es una forma de radioterapia sistémica que utiliza fuentes radiactivas abiertas, basada en la captación selectiva de un radiofármaco (RF) por una molécula blanco. La RTM es altamente eficaz para eliminar tejido tiroideo tumoral remanente luego de la extirpación quirúrgica de la glándula en cáncer diferenciado de tiroides, tumores neuroendócrinos, en el tratamiento del dolor en metástasis óseas, entre otras dolencias. El éxito de la RTM está ligado a la posibilidad de administrar altas actividades del RF sin perjudicar a los órganos del cuerpo que no son el blanco del tratamiento. La Dosimetría Interna, es decir el cálculo de la dosis que absorben selectos órganos en una RTM, es un área de desempeño ideal para los físicos médicos, ya que para su correcta aplicación deben confluir conocimientos de física, matemática y biología. En este trabajo abordaremos el relevamiento de las aplicaciones de Medicina Nuclear en Argentina, en base a las Licencias y Registros de utilización de RF vigentes a la fecha. El objetivo es tratar de analizar el mapa de situación de las RTM que se realizan en cada región de nuestro país. Aunque la realización de cálculos dosimétricos no es condición sine qua non para la aplicación de RTM, daremos cuenta de los centros donde se llevan a cabo estos procedimientos. Asimismo, realizaremos una breve reseña de los abordajes de los cálculos dosimétricos en orden de creciente complejidad, de la posibilidad de utilizar simulaciones computacionales y softwares libres para la realización de cálculos dosimétricos mediante fantomas antropomórficos específicos y destacaremos la importancia de realizar dosimetría interna como planeamiento de RTM a fin de aumentar la eficacia de los tratamientos.

Hadronterapia: desarrollo del código Monte Carlo MDM-Ion para estudiar parámetros físicos relevantes en dosimetría de referencia

• Verónica Tessaro,[1] Mariel Elisa Galassi,[1] Floriane Poignant,[2] Michael Beuve,[2] Benoit Gervais[3]

[1] *CIEM - CONICET*
[2] *Université de Lyon, F-69622; Université de Lyon 1,CNRS/IN2P, Institut de Physique Nucléaire de Lyon - Villeurbanne (France)*
[3] *Centre de Recherche sur les Ions, les Matériaux et la Photonique (UMR6252), CEA/CNRS/ENSICAEN/Université de Caen-Basse Normandie UCBN, CIMAP-CIRIL-Ganil, BP 5133, 1070, Cedex 05 - Caen (France)*

Los códigos Monte Carlo (MC) de transporte de partículas representan importantes herramientas computacionales, con la capacidad de simular todas las interacciones físicas involucradas por el proyectil a medida que atraviesa un medio. También permiten simular las interacciones de todas las partículas secundarias generadas. Por este motivo, estos códigos son muy utilizados en el campo de la física de las radiaciones para estudiar la deposición de energía en diferentes medios.
En este trabajo se presenta en detalle el código MDM-Ion desarrollado para estudiar la traza de iones en agua líquida y medios gaseosos. Este código representa una nueva rama del código Monte Carlo MDM, desarrollado para simular el transporte de electrones y fotones, en diferentes medios heterogéneos (MDM para MeDiuM) [1,2]. El objetivo del código MDM-Ion es estudiar algunos parámetros físicos de interés en dosimetría de referencia para protonterapia y hadronterapia en la que se utilizan cámaras de ionización. Estos parámetros son los cocientes de poderes de frenado agua líquida/aire y los valores W en el aire, definidos como la energía media necesaria para generar un par ión−electrón por la partícula incidente y todos los electrones secundarios generados. La relevancia en su estudio se debe a que son los que más contribuyen a las incertidumbres en la determinación de la dosis [3]. En el presente trabajo se mostrarán resultados obtenidos, en muy buen acuerdo con datos recomendados [4,5]. A futuro se extenderán las capacidades del código a fin de estudiar otros medios gaseosos de relevancia en dosimetría.

Referencias:

[1] F. Poignant, C. Monini, É Testa, and M. Beuve, *Influence of gold nanoparticles embedded in water on nanodosimetry for keV photon irradiation* Med. Phys. **48**, 1874 (2020).
[2] V. Tessaro, F. Poignant, B. Gervais, M. Beuve, and M. Galassi, *Theoretical study of W-values for particle impact on water*, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B **460**, 259 (2019).
[3] Andreo P. *et al.*, *Absorbed Dose Determination in External Beam Radiotherapy*, IAEA TRS-398. Vienna; (2000).
[4] ICRU REPORT 49, Stopping Powers and Ranges for Protons and Alpha Particles, (2015).
[5] V. Tessaro, F. Poignant, B. Gervais, M. Beuve, and M. Galassi, *Monte Carlo transport of swift protons and light ions in water: the influence of excitation cross sections, relativistic effects and Auger electron emission in w-values.* Phys. Med. **88**, 71 (2021).

Caracterización del hiperinsulinismo congénito basado en imágenes de PET/CT utilizando [^{18}F]fluoro-L-DOPA

• Vanesa Genez,[1] Marcelo Ruffolo,[1] María Bastianello,[2] Brenda Konowalik,[2] Alejandro Valda,[1] Amalia Pérez[1]

[1] *Centro Universitario de Imágenes Médicas, Escuela de Ciencia y Tecnología, UNSAM*
[2] *Sección de Imágenes Moleculares y Terapia Metabólica, Hospital Universitario CEMIC*

El hiperinsulinismo congénito (HIC) es una enfermedad del páncreas que causa hipoglucemia debido a una anormal secreción de insulina por parte de sus células tipo beta. El diagnóstico clínico está basado en la detección elevada de insulina en plasma y requiere urgente tratamiento farmacológico y/o quirúrgico para evitar daño cerebral severo y permanente. Algunos pacientes responden al tratamiento farmacológico y otros requieren una pancreatectomía total o parcial, la cual dependerá de si el patrón de lesión histopatológico es difuso o focal, respectivamente. Cuando el HIC es de tipo focal la pancreatectomía parcial resulta ser curativa mientras que si es de tipo difusa frecuentemente requiere de una pancreatectomía extensiva cuya morbilidad es la diabetes mellitus y la insuficiencia pancreática exócrina, por lo tanto, es trascendente la determinación del tipo de lesión. Clínicamente ambas formas son indistinguibles, sólo se diferencian a nivel molecular a través de evaluaciones de anatomía patológica y/o mutaciones genéticas asociadas a esta enfermedad. El problema es que los resultados de estas evaluaciones demoran varias semanas. Diferentes grupos de trabajo han reportado la utilidad de la modalidad de imágenes PET/CT utilizando como radiotrazador 3,4-dihidroxi-6-[^{18}F]fluoro-L-fenilalanina ([^{18}F]fluoro-L-DOPA) para el diagnóstico de HIC en corto tiempo, el cual permite diferenciar entre caso difuso y focal de acuerdo al patrón de hipercaptación que manifiesta la imagen de la glándula. Además, la localización de la lesión focal que ofrecen las imágenes es información transcendente para establecer la estrategia quirúrgica. En bibliografía se ha reportado que si la relación entre mediciones de SUV (valor de captación estandarizado) en zonas hipercaptantes en cabeza, cuerpo y cola del páncreas, respecto de la captación máxima de fondo aparentemente normal es mayor o igual a 1,5, corresponde a una lesión de tipo focal, mientras que valores elevados de SUV superiores a 2, generalizados a lo largo del páncreas, representan casos difusos. Sin embargo, entre estos escenarios surgen en la clínica una diversidad de situaciones cuya determinación en el tipo de lesión depende fuertemente del valor de SUV considerado de fondo. En este trabajo analizamos, de forma retrospectiva, la distribución de valores de SUV a lo largo del páncreas con el objetivo de establecer un criterio para la determinación del valor de fondo medio. Las mediciones se realizaron sobre la base de datos de enfermos pediátricos de la Sección de Imágenes Moleculares y Terapia Metabólica de CEMIC. Los resultados alcanzados con estas mediciones muestran un mejor ajuste de los resultados proporcionados por la imagen PET/CT a los resultados tardíos obtenidos por la anatomía patológica, la que es considerada el criterio de referencia.

Segmentación de imágenes PET/CT con [^{18}F]fluorotimidina de pacientes con patología oncológica linfoproliferativa

• Yamila Rotstein Habarnau,[1] Germán Pitarch,[2] María Bastianello,[2] Amalia Pérez,[1] Alejandro Valda[1]

[1] *Centro Universitario de Imágenes Médicas, Escuela de Ciencia y Tecnología, UNSAM*
[2] *Sección de Imágenes Moleculares y Terapia Metabólica, Hospital Universitario CEMIC*

El linfoma difuso de células grandes B (LDCGB) es el subtipo más común de los linfomas no Hodgkin. El procedimiento estándar para la estadificación y seguimiento de este tipo de linfomas es a través de imágenes PET/CT con [^{18}F]fluorodesoxiglucosa ([^{18}F]FDG). La evaluación de estas imágenes se hace actualmente de forma semi-cuantitativa. En los últimos años se ha propuesto la [^{18}F]fluorotimidina ([^{18}F]FLT) como un marcador de la proliferación celular, que podría ser más específico del tumor que la [^{18}F]FDG. El primer paso hacia un análisis cuantitativo de las imágenes PET/CT en LDCGB consiste en la segmentación del conjunto de lesiones tumorales. Esta segmentación se realiza sobre la imagen PET, a partir del valor de captación estandarizado SUV. Para [^{18}F]FDG, se han analizado en la literatura diversos umbrales de SUV. Algunos son fijos, o relativos a alguna región de referencia, entre otros. Para[^{18}F]FLT, en cambio, no existen valores umbrales establecidos. En este proyecto estudiamos imágenes PET/CT de LDCGB adquiridas utilizando tanto [^{18}F]FDG como [^{18}F]FLT. Sobre un conjunto de pacientes analizamos diferentes métodos de segmentación sobre las imágenes adquiridas con [^{18}F]FLT con el fin de encontrar aquel que mejor delinee las lesiones en términos de su número y del volumen metabólicamente activo total. En particular, nos centramos en umbrales relativos a la captación en hígado y en médula ósea, encontrando métodos capaces de delinear satisfactoriamente las regiones de interés.

Evaluación de materiales utilizados como blindaje de radiaciones ionizantes

• Venecia M. Calandrón,[1] Paula C. Cédola,[1] Laura Cristina Damonte[2]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas - Universidad Nacional de La Plata*
[2] *Instituto de Física La Plata, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP - CONICET*

La radiación ionizante (RI) es un tipo de energía liberada por los átomos en forma de ondas electromagnéticas (rayos X o rayos gamma) o partículas (beta, alfa o neutrones). La aplicación de la RI ha ido creciendo en los últimos años en diversas áreas, como investigación, industria y salud. Distintos estudios han dejado en evidencia los beneficios de su implementación en el campo de la salud tanto en diagnóstico como en tratamiento. Sin embargo, es necesario evaluar y controlar el posible riesgo, mediante la seguridad y protección radiológica (PR). La PR requiere entre sus principios más importantes controlar la exposición a la radiación sin excederse de los límites de dosis establecidos por recomendaciones internacionales, para ello es necesario considerar tres variables, tiempo, distancia y blindaje. El blindaje es de gran importancia para controlar la dosis que reciben los trabajadores de instalaciones y del público en general. Su diseño y/o elección dependerá del tipo de radiación ionizante que se utilice. La atenuación de la radiación gamma difiere cualitativamente de las radiaciones alfa o beta que tienen menor alcance y son atenuadas con bajos espesores de material, mientras que la radiación gamma tiene mayor alcance y para reducir su intensidad es necesario un material absorbente cada vez más grueso. Es posible medir los rayos gamma monoenergéticos registrando los datos de intensidad de la radiación frente al espesor del material absorbente con el fin de conocer el coeficiente de atenuación lineal que permite caracterizar las propiedades de atenuación de los distintos materiales. En este trabajo evaluamos la atenuación de la radiación gamma por distintos materiales utilizados en recintos hospitalarios, construcción de viviendas o con propósitos de protección radiológica.

Referencias:

[1] Y. Al-Hadeethi, M.I. Sayyed, and Manasa Nune *Radiation shielding study of WO3–ZnO–PbO–B2O3 glasses using Geant4 and Phys-X: A comparative study* Ceramics International **47**, 3988 (2021).
[2] Y.S. Rammah, I.O. Olarinoye, F.I. El-Agawany, A. El-Adawy, and El Sayed Yousef *The impact of PbF2 on the ionizing radiation shielding competence and mechanical properties of TeO2–PbF2 glasses and glass-ceramics* Ceramics International **47**, 2547 (2021).
[3] https://www.insst.es/documents/94886/162520/CapC3ADtulo+48.+Radiaciones+ionizantes

Selective microstructure-size filters for non-invasive quantitative imaging by magnetic resonance

• Analía Zwick,[1,2] Milena Capiglioni,[3] Pablo Jimenez,[3] Gonzalo A. Alvarez[1,2,3]

[1] *Instituto de Nanociencia y Nanotecnología, CONICET–CNEA, Centro Atómico Bariloche*
[2] *Centro Atómico Bariloche - CONICET, Comisión Nacional de Energía Atómica*
[3] *Instituto Balseiro - Universidad Nacional de Cuyo*

Extracting quantitative microstructure information of living tissue by non-invasive imaging is an outstanding challenge for understanding disease mechanisms and allowing early stage diagnosis of pathologies. Magnetic Resonance Imaging (MRI) is a promising and widely used technique to pursue this goal, but still provides low resolution to reveal microstructure details [1]. We here report on a method to produce images of filtered microstructure-sizes based on selective probing of nuclear-spin dephasing induced by the molecular diffusion within specific tissue-compartments [2]. The microstructure-size filter relies on suitable dynamical control of nuclear spins that sense magnetization decay-shifts rather than the commonly used spin-echo decay-rates. The feasibility and performance of the method are illustrated with proof-of-principle experiments and simulations on typical size-distributions of white-matter in the mouse brain [3]. These results show that spin-echo decay-shifts can be a new MRI paradigm to advance towards unravelling diagnostic information based on microstructure parameters that characterize biological tissues.

Referencias:

[1] A. Zwick, D. Suter, G. Kurizki, and G. A. Álvarez, Phys. Rev. Applied **14**, 024088, (2020).
[2] M. Capiglioni, A. Zwick, P. Jiménez, and G. A. Álvarez. Proc. Intl. Soc. Mag. Reson. Med. **29**, 2036 (2021).
[3] M. Capiglioni, A. Zwick, P. Jiménez, and G. A. Álvarez, Phys. Rev. Applied **15**, 014045 (2021).

Incidencia de electrodos adicionales en catéteres de ablación por radiofrecuencia

• Julián Gómez,[1] Enrique Berjano,[2] Ramiro Miguel Irastorza[1,3,4]

[1] *Instituto de Ingeniería y Agronomía, Universidad Nacional Arturo Jauretche*
[2] *BioMIT, Department of Electronic Engineering, Universitat Politècnica de València, Valencia, Spain*
[3] *Grupo de Materiales Granulares, Departamento de Ingeniería Mecánica, Facultad Regional La Plata, Universidad Tecnológica Nacional*
[4] *Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos, CONICET, UNLP*

Los catéteres utilizados en ablación cardíaca suelen poseer una punta activa que se usa para ablacionar el tejido (además puede contener: orificios para infundir solución salina, sensores de presión y temperatura, etc.) y otros electrodos en forma de anillo separados unos milímetros de la punta, que son usados para estimular y mapear eléctricamente la zona. En este trabajo exploramos, mediante simulación computacional por el método de elementos finitos, la influencia de estos electrodos adicionales en el momento de la ablación cuando se utililzan altas potencias y tiempos cortos.

Estudio computacional de la incidencia de la fracción de volumen óseo en la conductividad eléctrica de hueso trabecular

• María José Cervantes,[1] Lucas Basiuk,[2] Manuel Carlevaro,[1,2] Ramiro M. Irastorza[1,2]

[1] *Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos, CONICET-UNLP*
[2] *Grupo de Materiales Granulares, Departamento de Ingeniería Mecánica, Facultad Regional La Plata, Universidad Tecnológica Nacional*

El estudio de las propiedades dieléctricas del hueso ha demostrado ser un método interesante para predecir la salud ósea, sin embargo es necesario conocer mejor estas propiedades y la relación con su microestructura. Por ello la cuantificación de la relación entre la conductividad eléctrica y la fracción de volumen óseo resulta de gran utilidad ya que conjuntamente con la tecnología de la Tomografía de Impedancia Eléctrica pueden predecir y evaluar la salud del hueso de forma no invasiva. Este trabajo pretende demostrar dicha relación a través de la construcción de modelos computacionales realistas para obtener la conductividad eléctrica efectiva con el método de elementos finitos y compararla con los resultados obtenidos por Balmer et al.[1].

Referencias:

[1] T W Balmer, S Vesztergom, P Broekmann, S Stahel, and P Büchler, Sci. Rep. **8**, 8601 (2018).

Análisis de la muerte celular por radiación ionizante utilizando nanopartículas de oro como radiosensibilizante en distintas líneas celulares tumorales

• Osvaldo Olguin,[1,2] Marcos Rizzotto,[1,2] Débora Cobos,[1] Jorge Horas[1,2,3]

[1] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Físicas, Matemáticas y Naturales - Universidad Nacional de San Luis*
[2] *Instituto De Matemática Aplicada San Luis, CONICET-UNSL*
[3] *Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas*

Se analiza un método alternativo para cuantificar el efecto radiobiológico de las AuNP (Nanoparticulas de Oro) mediante el Factor de Mejora de Radiosensibilidad (REF) usando los parámetros de radiosensibilidad del modelo Lineal Cuadrático (LQ) en condiciones con y sin AuNP (utilizadas como radiosensibilizantes) en diversas líneas celulares cancerígenas. Se contrastan ajustes de la Fracción de Sobrevida (SF) en ambas condiciones, usando el modelo LQ. Los datos son obtenidos de bibliografía y se los compara con los resultados obtenidos por otros autores, los cuales utilizan otra manera de obtención del parámetro REF. Los resultados obtenidos con nuestro método son aceptables, utilizando un ajuste simultáneo de los datos de irradiación con y sin AuNP aplicando un solo juego de parámetros de ajuste. Se muestra además el porcentaje de la reducción de la dosis cuando se utiliza la iradiación con AuNP.

Incorporación de modelo morfológico animal-símil en simulación Monte Carlo por medio de micro-tomografía computada de alta resolución

• Facundo Vitullo,[1,2] Mauro Valente,[1,2,3,4] Pedro Pérez[1,2,3,4]

[1] *Laboratorio de Investigación e Instrumentación en Física Aplicada a la Medicina e Imágenes de Rayos X, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina.*
[2] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*
[3] *CONICET*
[4] *Instituto de Fisica Enrique Gaviola*

Los procesos de transporte y colisión de radiación están gobernados, formalmente, por la ecuación principal de Boltzmann. Sin embargo, dicho formalismo carece de solución analítica, excepto en un acotado conjunto de casos, típicamente situaciones sobre-simplificadas y de poca utilidad o representación práctica. Por ello, los métodos de solución numérica a la ecuación de transporte de Boltzmann, entre los cuales se destaca la técnica Monte Carlo, han cobrado notable relevancia práctica. Actualmente, existen varios códigos de simulación Monte Carlo aplicada al transporte y colisión de radiaciones, entre ellos se encuentran: GRANT4, MCNPX, PENELOPE y FLUKA. Una de las posibles limitaciones de los diferentes códigos de simulación Monte Carlo refiere al grado de realismo y precisión en el abordaje de la geometría de simulación. De hecho, cada uno de los códigos implementa una metodología propia para definir el concepto de "cuerpo" (*BODY*), y por lo general configuraciones geométricas complejas resultan de difícil abordaje.
El presente trabajo reporta sobre los lineamientos básicos necesarios para el procedimiento de definir las propiedades morfológicas de animales pequeños en códigos de simulación Monte Carlo, proceso necesario para una amplia variedad de aplicaciones que van desde estudios dosimétricos hasta caracterización de propiedades anatómicas y funcionales. A modo de ejemplo, se presenta la adquisición de la información morfológica de un animal pequeño por medio de micro-tomografía de rayos X de alta resolución, junto al proceso de voxelización; y posterior estructuración de información digital para permitir la incorporación de la morfología al código FLUKA. A partir de la incorporación de la morfología al código de simulación Monte Carlo, se abre la posibilidad de todo tipo de estudios y aplicaciones de transporte de radiación sobre esta estructura.

Te escucho. Algunos tópicos para tener en cuenta para nuestra salud auditiva

• María Guadalupe Bertoluzzo,[1] Stella Maris Bertoluzzo,[1,2] Alan Ismael Tobares[2]

[1] *Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas - Universidad Nacional de Rosario*
[2] *Facultad de Ciencias Médicas - Universidad Nacional de Rosario*

La promoción de la salud es uno de los pilares sobre los que se sustenta una sociedad exitosa. La Organización Mundial de la Salud (OMS) considera que la salud es un estado de completo bienestar físico, mental y social, (y no solamente la ausencia de afecciones o enfermedades) y la promoción es el proceso que permite a las personas incrementar el control sobre su salud. Es por ello entonces que, la educación para la salud constituye un proceso mediante el cual individuos y grupos de personas aprenden a comportarse de una manera que favorece la promoción, el mantenimiento o la restauración de la salud (Park K., 2000). Por lo tanto es muy importante educar en clave de salud y para ello hay que llegar a ese individuo o grupo que queremos alcanzar, a través de los métodos de la educación para la salud. En este contexto, nuestro objetivo es sensibilizar a la comunidad sobre el cuidado de la audición para crear algunos hábitos saludables al respecto. Para ello proponemos a través de una experiencia guiada, que el usuario conozca el sentido de la audición, del cual el oído representa una de sus partes. Se trabajó en primera instancia con un video diseñado en función de nuestro objetivo. Posteriormente con ayuda del osciloscopio virtual, una computadora y un micrófono, se caracterizaron de manera sencilla, sonidos puros así como también sonidos generados por instrumentos y en particular con la voz humana. De manera guiada se relacionó la onda mecánica generada por las distintas fuentes y la onda observada en el osciloscopio. Seguidamente, mediante la escucha de sonidos de frecuencias entre 200 Hz hasta 1500Hz, se analizó la relación entre frecuencia e intensidad de nivel de detección del sonido por el usuario. Luego se observaron las ondas características en el osciloscopio, de distintos vocablos emitidos por voces humanas, para analizar su estructura y su rango de frecuencias. De esta manera se llegó a comprender que el oído humano es un sistema complejo y miniaturizado cuya finalidad es captar y concentrar las ondas de presión para convertirlas en impulsos nerviosos. Que si bien, las energías requeridas para su excitación son mínimas, lo más sorprendente del oído es su eficacia en la detección de las diferentes frecuencias y su capacidad para discernir entre sus distintos valores. Que el sistema auditivo forma un conjunto indisoluble con el cerebro, aportándole los impulsos nerviosos auditivos, el que transformará magníficamente en una sensación. A través de esta experiencia guiada, se comprendió que hay un rango de ondas de presión que podemos captar, y que dentro de ese rango hay un intervalo de frecuencias, donde el sistema es más sensible. Es decir, en esas frecuencias (alrededor de los 1000hz) el oído detecta el sonido con muy baja intensidad, y el aumento de dicha intensidad rápidamente se torna molesto. Por otro lado se pudo observar que los sonidos vocales, están compuestos por un conjunto de frecuencias que se encuentran entre el rango de 1000Hz y 3500Hz. En esas frecuencias los sonidos se perciben como agudos, y es precisamente en ese rango, donde se observó que el oído es más sensible. Todo esto nos hace tomar conciencia que es necesario cuidar nuestra audición de sonidos de frecuencia de ese rango con intensidad alta porque nos podría ocasionar una pérdida de audición en esas frecuencias, fundamentales para nuestra comunicación con el resto de nuestro congéneres.

Electrodinámica no relativista en altas derivadas en 1+1 dimensiones. Integral de camino y formalismo BRST

• Edmundo C. A. Manavella,[1] Ricardo R. Addad[1]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura - Universidad Nacional de Rosario*

Partiendo de la electrodinámica no relativista clásica en 1+1 dimensiones, se propone una versión en altas derivadas. Esto se hace adicionando un adecuado término en altas derivadas para el campo electromagnético a la Lagrangiana de la electrodinámica original, preservando su invariancia de gauge. Extendiendo el algoritmo de Faddeev-Senjanovic, se lleva a cabo la cuantificación de la integral de camino. De aquí, se establecen las reglas de Feynman y se analiza la estructura diagramática. El uso del término en altas derivadas elimina en el gauge de Landau la divergencia ultravioleta de los diagramas de Feynman primitivamente divergentes del modelo original donde está presente el propagador del campo electromagnético. Se trata el problema de la unitariedad, relacionado con la posible aparición de estados con norma negativa. También se considera una generalización de la cuantificación BRST.

Electrodinámica no relativista en altas derivadas en 1+1 dimensiones. Cuantificación canónica

• Edmundo C. A. Manavella,[1] Ricardo R. Addad[1]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura - Universidad Nacional de Rosario*

Partiendo de la electrodinámica no relativista clásica en 1+1 dimensiones, se propone una versión en altas derivadas. Esto se hace adicionando un término adecuado en altas derivadas para el campo electromagnético a la Lagrangiana de la electrodinámica original, preservando su invariancia de gauge. Siguiendo el método Hamiltoniano usual para sistemas en altas derivadas singulares, se desarrolla la cuantificación canónica para el modelo en altas derivadas.

Gravitón clásico y dispersión en el contexto del Formalismo de Superficies Nulas

• Melina Bordcoch,[1] Teresita Rojas,[1,2] Carlos Kozameh[3]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad Nacional de Catamarca*
[2] *Centro de Investigaciones y Transferencia de Catamarca, CONICET*
[3] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*

Se denomina gravitón clásico a un espaciotiempo asintóticamente plano de vacío globalmente hiperbólico que no contiene horizontes. Estos espacios tienen cualidades matemáticas y físicas tales que es posible, por un lado, cuantizar el dato de radiación tanto en el infinito nulo pasado como en el infinito nulo futuro y, por otro lado, construir el espacio de fase con estructura compleja del gravitón clásico, brindando así, un espacio de Hilbert para gravitones cuánticos. Relacionar la radiación del infinito pasado, considerada como radiación entrante, con la del infinito futuro, considerada como radiación saliente, implica obtener la matriz de scattering y para ello es necesario una ecuación de evolución dinámica que vincule los campos radiativos con los campos dentro del espaciotiempo: las ecuaciones del Formalismo de Superficies Nulas cumplen con esta tarea. En este trabajo se muestra cómo el uso del NSF contribuye con el estudio del fenómeno de dispersión en el régimen clásico.

Correladores y flujo espectral en $AdS_3 \times S^3 \times T^4$

• Sergio Iguri,[1] Nicolas Kovensky,[2] Julian Hernan Toro[1,3]

[1] *Instituto de Astronomía y Física del Espacio, CONICET-UBA*
[2] *Institut de Physique Théorique, CEA/ Saclay*
[3] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*

La teoría de cuerdas ofrece un escenario teórico idóneo para explorar conceptos de gravedad cuántica. En este trabajo abordamos el cálculo de correladores para el modelo que describe la propagación de la supercuerda en $AdS_3 \times S^3 \times T^4$. En una primera instancia la cuantización BRST y una correcta proyección GSO nos permite seleccionar del espectro los estados físicos con hasta una excitación fermiónica y carga de flujo espectral arbitraria. Luego recuperamos los resultados conocidos para correladores que conservan *winding* y, finalmente, calculamos las funciones de dos y tres puntos para asignaciones arbitrarias de las cargas de cada estado, permitiendo así la violación de la conservación de flujo espectral.

Deposiciones de baja energía en detectores Skipper-CCD

• Lucas Giardino,[1] Guillermo Fernández Moroni,[2] Javier Tiffenberg[2]

[1] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*
[2] *Fermi National Accelerador Laboratory, DOE, EEUU*

Los detectores Skipper-CCD son capaces de medir deposiciones de carga de con resolución espacial micrométrica, gracias a su segmentación en píxeles de dimensiones $15\ \mu$m $15\ \mu$m $675\ \mu$m. La electrónica de lectura usada permite registrar estas deposiciones de manera no destructiva, de forma que es posible reducir el ruido de lectura hasta el régimen sub-electrón. Por estos motivos, el Skipper-CCD es una de las tecnologías más prometedoras para la realización de experimentos de detección de partículas con deposiciones que produzcan ionización de uno o más pares hueco-electrón.
Una de las limitantes actuales es el número de deposiciones observadas a baja energía (< 10 eV). Por la dificultad de la medición en este rango de energías existe poca bibliografía que explique posibles mecanismos de producción de eventos de forma concluyente. Recientemente, el experimento SENSEI (Sub-Electron-Noise Skipper-CCD Experimental Instrument) ha mostrado una correlación entre estas deposiciones de energía y el flujo de partículas de alta energía en mediciones con Skipper CCD bajo tierra. Un posible mecanismo de producción es la emisión de fotones por radiación Cherenkov producida por partículas cargadas atravesando el Silicio y los materiales circundantes del sensor.
Estos mecanismos de producción son especialmente importantes en experimentos situados sobre la superficie terrestre, donde el flujo de muones y otras partículas cósmicas es mucho mayor que en laboratorios bajo tierra.
En este trabajo se estudia la producción de eventos de baja energía (< 5 eV) específicamente para muones atmosféricos. Los resultados son obtenidos utilizando un Skipper-CCD a nivel del mar. Se realiza una caracterización espacial de las deposiciones de baja energía en torno a trazas de muones y se compara con el número de fotones esperado teóricamente por radiación Cherenkov. El objetivo final es el desarrollo de una técnica para la caracterización de la producción de fotones en diferentes materiales por partículas de alta energía. Este desarrollo puede ser utilizado posteriormente en la selección de mejores materiales para la construcción de experimentos.

Características principales de un universo homogéneo e isotrópico

• Pamela Liseth Contreras,[1] Teresita Alejandra Rojas,[1,2] Melina Bordcoch[1]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad Nacional de Catamarca*
[2] *Centro de Investigaciones y Transferencia de Catamarca, CONICET*

La Teoría de la Relatividad General plantea que el espacio-tiempo es una variedad cuatridimensional en la cual la métrica está relacionada con la distribución de materia y energía a través de la ecuación de Einstein. Nuestro objetivo es estudiar las soluciones de la ecuación de Einstein, que describen diferentes modelos idealizados de universo, en particular modelos cosmológicos homogéneos e isotrópicos a fin de estudiar los aspectos centrales de la Teoría de Einstein en esos contextos cosmológicos para un Tensor Métrico del tipo Robertson Walker.

Estrategias de búsqueda de un nuevo escalar neutro de baja masa producido en asociación con un par de quarks top en el detector ATLAS del LHC

• Jean Yves Beaucamp[1]

[1] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata*

Proponemos investigar la posible producción de un nuevo escalar neutro (X) de baja masa en asociación con un par de quarks top, que es predicho en extensiones del Modelo Estándar (ME) de partículas y sus interacciones fundamentales. Este escalar podría generarse en las colisiones p-p del LHC del CERN y ser observadas en ATLAS. En el rango de masa de 10 a 60 GeV, esta partícula puede decaer en pares de leptones taus en un régimen en que no pueden resolverse separadamente en el detector. Los más grandes desafíos de esta búsqueda experimental radican en la reconstrucción y caracterización de estos decaimientos boosteados de la partícula X para su identificación y en la determinación precisa de los fondos de eventos del ME que pueden contaminar la señal de nueva física.

Conformación e invitación a participar de grupo de trabajo en Microlentes con LSST

• Carlos Argüelles,[1] Ezequiel Boero,[2] Martín Chalela,[2,3] Rodrigo Díaz,[4,5] Emanuel Gallo,[6,7] Diego García Lambas,[3,8] Elizabeth Gonzalez,[3,8] Martin Makler,[9,10,11] Damián Mast,[3] Luis Augustín Nieto,[5] Anibal Varela[12]

[1] *Instituto de Física, Facultad de Cs. Exactas, Universidad Nacional de La Plata*
[2] *Instituto de Astronomía Teórica y Experimental, Observatorio Astronómico Córdoba, CONICET-UNC*
[3] *Observatorio Astronómico de Córdoba*
[4] *Instituto de Ciencias Físicas-UNSAM-CONICET*
[5] *International Center for Advanced Studies- Escuela de Ciencia y Técnica- Universidad de San Martín*
[6] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*
[7] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*
[8] *Instituto de Astronomia Teorica y Experimental, Cordoba*
[9] *Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro, Brazil*
[10] *Instituto de Ciencias Físicas, UNSAM*
[11] *International Center for Advanced Studies, Universidad de San Martín*
[12] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*

El Vera Rubin Telescope Legacy Survey of Space and Time (LSST) empezará sus observaciones en los próximos años y será el relevamiento de imágenes hecho desde la Tierra más importante de su tiempo. Su ciencia abarca desde objetos en nuestro sistema solar hasta el estudio de las mayores estructuras en el Universo. El LSST cubrirá un área de la esfera celeste sin precedentes y con mayor profundidad que cualquier relevamiento actual en grandes áreas. Su aspecto más innovador está en la capacidad de revisitar la misma región del cielo con gran frecuencia, generando una "película" del cielo. Con eso, LSST abre una ventana de oportunidades para la búsqueda de transitorios, entre los cuales se encuentran los eventos de microlente gravitacional. Esos eventos son causados por la deflexión de la luz producida por objetos condensados, que pueden ser estrellas, planetas, agujeros negros u objetos más exóticos formados por materia oscura, como grumos de axiones. De esa forma, el estudio del efecto de microlentes en LSST puede aportar informaciones sobre la materia oscura, la distribución de objetos compactos, exoplanetas y la historia de formación de los componentes de nuestra galaxia, entre otros. Motivados por la futura disponibilidad de los datos, se conformó un grupo de trabajo en Argentina, con la finalidad de proponer y desarrollar estudios de microlentes a realizarse con LSST, en concordancia con otros instrumentos que faciliten el seguimiento de los posibles eventos que se detecten. El objetivo es abarcar desde aspectos teóricos hasta el análisis de datos, pasando por simulaciones y procesamiento de imágenes. En esta contribución presentaremos las acciones e intereses actuales del grupo y resultados preliminares obtenidos hasta la fecha. Convocamos a las personas de la comunidad interesadas en la aplicación de técnicas de microlentes a contactarse con el grupo para llevar a cabo la diagramación y posterior ejecución de los proyectos relacionados con la temática.

Una Función C para campos de Dirac sobre espacios esféricos de dimensión impar

• Juan José Gervasio[1]

[1] *Instituto de Física de La Plata, Dpto. de Física, FCE - UNLP*

En el presente trabajo estudiamos la existencia de funciones C para una teoría de campo de Dirac masivo sin interacción, sobre un espacio esférico de dimensión impar arbitraria, que denotamos S^{2k+1}. Motivados por resultados previos, analizamos si la acción efectiva a 1-loop $S^{(k)}_{eff}$ satisface todas las condiciones de una función C para esta teoría, encontrando que no lo hace completamente. Proponemos una nueva cantidad, definida a partir de $S^{(k)}_{eff}$, que sí resulta una buena función C para la teoría, en dimensión impar arbitraria.

Construcción de una base de Operadores Tensoriales Esféricos Irrerducibles

• Benjamín R. Marcolongo[1]

[1] *Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación, Universidad Nacional de Córdoba*

Propondremos métodos sistemáticos para construir una base de Operadores Tensoriales Esféricos Irreducibles (OTESI) para un espacio de Hilbert de dimensión finita $\mathcal{B}(\mathcal{H}_n)$. Éste es interpretado físicamente como el espacio de las observables (o propiedades dinámicas) de un sistema físico. Matemáticamente $\mathcal{B}(\mathcal{H}_n)$ es el espacio de operadores lineales que actúan en $\mathcal{H}_n = \left(\mathbb{C}^{2s+1}\right)^{\otimes n}$, este último representa los estados puros dicho sistema (compuesto por n objetos cuánticos con spin idéntico s).
Los OTESI expanden espacios irreducibles V_l, $l \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$, de la acción unitaria del grupo de rotaciones SO(3) en $\mathcal{B}(\mathcal{H}_n)$. Por lo que éste se descompone como suma directa de tales espacios:

$$\mathcal{B}(\mathcal{H}_n) = \bigoplus_{l \in \mathbb{Z}_{\geq 0}} N(l,n) V_l. \tag{1}$$

Las multiplicidades $N(l,n)$ con la que aparecen también son objeto de estudio de la presentación. En particular proveeremos dos formas alternativas de calcularlas, una mediante álgebra lineal básica y otra a través de la dualidad de Schur representando SU(2)$\times S_{2n}$ en $(\mathbb{C})^{\otimes 2n}$. También se demostrará que la suma (1) se realiza sobre los enteros (no hay representaciones semi-enteras), aunque esto ya fue previamente probado de modo diferente en [1].
El problema surge explícitamente en la tesis doctoral de C.J Bonin [2] que construye una base con esta propiedad para 4 spin $\frac{1}{2}$ (cuatro protones magnéticamente "activos" en la RMN de un cristal líquido molecular). Las multiplicidades para un sistema de n partículas con spin $\frac{1}{2}$ fue calculada por primera vez en un seminario [3] dictado por G.R. Raggio; que luego se elabora y generaliza a spin arbitrario en la tesis de licenciatura, [1], que sirve como principal antecedente de este trabajo.

Referencias:

[1] Sznajderhaus, N. *Multiplicidades de Operadores Tensoriales Esféricos Irreducibles en la Reducción de un Sistema de N espines de valor s*; Tesis de Licenciatura en Ciencias Físicas, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires. (2012).
[2] Bonin, C.J., *Estudio de Cuasi-invariantes Dipolares en Cristales Líquidos Termotrópicos por Coherencias Cuánticas Múltiples En Resonancia Magnética Nuclear.* Tesis doctoral, Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Universidad Nacional de Córdoba, 2011.
[3] Raggio, G. A., *Reducción de la representación del grupo de rotaciones inducida en los observables de un sistema de N espines 1/12*; Seminario del Grupo de Teoría de Materia Condensada, FaMAF, disponible en: http://www.famaf.unc.edu.ar/gtmc/node/84. (2011)

Estados de borde copropagantes producidos por interacción entre electrones y fonones quirales en sistemas bidimensionales

• Hernán L. Calvo,[1] Joaquín Medina-Dueñas,[2] Luis E. F. Foa Torres[2]

[1] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*
[2] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile*

A diferencia de la quiralidad de los electrones, recién en los últimos años se ha visto un aumento en el estudio de propiedades quirales en fonones. En este trabajo reportamos el efecto de la interacción electrón-fonón con fonones quirales en dos dimensiones. Utilizando una solución no perturbativa y no adiabática en el espacio de Fock, mostramos cómo esta interacción puede dar lugar a estados vibrónicos copropagantes a lo largo de los bordes de la muestra. Esta interacción introduce procesos no verticales entre valles, abriendo un gap de energía en uno de ellos únicamente. Estudiamos dicha solución a partir del análisis de la estructura de bandas del sistema compuesto y sus propiedades de transporte, donde observamos que los estados de borde son robustos frente a una cantidad moderada de desorden de vacancias. Nuestros resultados proporcionan un primer paso hacia el análisis de los posibles efectos que pueden derivar a partir de la interacción con fonones quirales.

Estudio teórico y caracterización de microestructuras en ánodos de litio metálico, mediante espectros de RMN

• Muriel Zampieri,[1] Santiago Maldonado Ochoa,[1,2] Manuel Otero,[1,2] Fabián Vaca Chávez[1,2]

[1] *Instituto de Física Enrique Gaviola (IFEG) - CONICET - Córdoba, Argentina.*
[2] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*

Las baterías con ánodos de litio metálico se presentan como un prometedor sistema para el almacenamiento de energía debido a las múltiples ventajas que este material ofrece. Luego de varios ciclos electroquímicos de carga y descarga, se forman microestructuras en la superficie del electrodo de litio metálico, llamadas dendritas. Estas ramificaciones pueden ocasionar un cortocircuito que derivan en descargas espontáneas, volviéndolas inseguras. La caracterización de estas microestructuras contribuye al desarrollo para encontrar alternativas con fin de evitar los inconvenientes que éstas producen. En este trabajo se presenta un estudio teórico del efecto de la morfología de dichas microestructuras en los espectros de Resonancia Magnética Nuclear. Las simulaciones se llevaron a cabo mediante herramientas numéricas basadas en el método de elemento finito, utilizando un algoritmo que permite calcular las variaciones de campo magnético inducido por una distribución de susceptibilidad de un objeto.

Secuencia de solidificación de aleaciones Sn-Cu-Ag modificadas con Bi

• Evangelina Gutierrez,[1,2] Carina Morando,[2,3] Osvaldo Fornaro[2,3]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas, UNCPBA*
[2] *Instituto de Física de Materiales de Tandil - Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires*
[3] *Centro de Investigaciones en Física e Ingeniería del Centro de la Pcia. de Buenos Aires (CIFICEN), UNCPBA - CONICET, Tandil, Argentina*

Las aleaciones Sn-Ag-Cu son candidatas a ser utilizadas en la union y soldadura de dispositivos electrónicos en lugar de las históricamente más utilizadas de Sn-Pb. El motivo del reemplazo es disminuir el efecto medioambiental de la deposición y descarte de componentes electrónicos conteniendo Pb. Estos cambios son impulsados por dos directivas que entraron en vigencia a partir del 2006 denominadas Rohs [Union Europeenne. Directive 2002/96/ec on waste electrical and electronic equipment (weee). J.EU, 37:24–38, 2003] y WEEE [EEUU Directive. Restriction of the use of certain hazardous substances in electrical and electronic equipment (rohs). Off. J. Eur. Communities, 46:19–23, 2013]. El comportamiento y propiedades de las aleaciones libres de plomo es un campo bastante fructífero. Particularmente, la secuencia de solidificación se desarrolla en cercanías del equilibrio, pero se ve afectada por la formación de fases secundarias intermetálicas $\eta(Cu_6Sn_5)$ Y $\epsilon(Ag_3Sn)$. Uno de los efectos no deseados durante la utilización de esta aleación como aporte de soldadura, es el sobreenfriamiento metaestable de la fase Sn durante la solidificación. Una de las soluciones propuestas es el añadido de Bi en la la aleación que modifica tanto la secuencia de solidificación como las temperaturas características de la transición.
En este trabajo se realizó el estudio experimental de curvas de enfriamiento de la aleación Sn-Ag-Cu eutéctica, modificada con Bi por medio de 0, 0.5 , 1 , 2 y 3% en peso de Bi. Adicionalmente se analizó el efecto del contendido de Bi sobre la aleación original utilizando el software OpenCALPHAD (v 6.031) y bases de datos adecuadas de acceso libre.

Tiempos de respuesta a la luz UV en películas fotoconductivas delgadas de ZnO y ZnO:Al

• Claudia D. Bojorge,[1] Mario F. Bianchetti,[1] Eduardo A. Heredia,[1] Horacio R. Cánepa[1]

[1] *Centro de Investigación en Sólidos, Instituto de Investigaciones Científicas y Técnicas para la Defensa, UNIDEF (CONICET-MINDEF)*

El ZnO es un óxido metálico semiconductor del grupo II-VI con un ancho de banda prohibido directo, comprendido entre 3,2 y 3,37 eV. Debido a su energía de ligadura excitónica de 60 mV ha despertado gran interés en su aplicación en dispositivos que actúan en el rango espectral del UV a temperatura ambiente, como diodos emisores de luces (LEDs), diodos laser y dispositivos detectores de UV, entre otras cosas, especialmente en forma nanoestructurada. Una de las principales características del ZnO es presentar una fotoconductividad marcada en el rango del espectro UV. Estos cambios de la conductividad eléctrica debido a la acción de la radiación UV incidente dependen, entre otras cosas, de los mecanismos de generación y recombinación de portadores de cargas, de la densidad de estados en la banda prohibida y de la concentración de gases en el medio exterior. En el presente trabajo se estudia la fotoconductividad UV de películas delgadas nanoestructuradas de ZnO y ZnO:Al, sintetizadas por método de sol-gel y depositadas sobre sustratos de SiO2 por spin-coating. Se analizan y comparan los tiempos de respuesta observados de muestras puras y dopadas y se discuten los resultados.

Fotoconductividad persistente en películas delgadas nanoestructuradas de ZnO

• Claudia D. Bojorge,[1] Mario F. Bianchetti,[1] Eduardo A. Heredia,[1] Horacio R. Cánepa[1]

[1] *Centro de Investigación en Sólidos, Instituto de Investigaciones Científicas y Técnicas para la Defensa, UNIDEF (CONICET-MINDEF)*

El ZnO es un semiconductor con un ancho de banda prohibido de 3,37eV y una energía de ligadura excitónica de 60mV. Estas características lo convierten en un material de interés para aplicaciones como diodos emisores de luces (LEDs), diodos laser y dispositivos detectores de UV, entre otras cosas. El fenómeno de la fotoconductividad es una propiedad fundamental en los semiconductores por medio de la cual la conductividad del material cambia debido a la radiación incidente. Este fenómeno todavía resulta complejo por los muchos aspectos de un semiconductor que involucra: absorción óptica, cinética de recombinación de portadores, defectos que controlan el tiempo de vida y propiedades de transporte etc. Entre los efectos que a veces se generan vinculados a este fenómeno es el que se conoce como fotoconductividad persistente (PPC). Este efecto PPC es la fotoconductividad que puede permanecer por un tiempo muy largo luego de que la fuente de excitación lumínica se haya desconectado. En el presente trabajo se estudia la fotoconductividad de películas delgadas nanoestructuradas de ZnO sintetizadas por método de sol-gel y depositadas sobre sustratos de SiO2 por spin-coating. Se discuten los resultados, los tiempos característicos observados en la PPC y los posibles mecanismos involucrados.

Estudio de las curvas ID vs VD para distintos VG en transistores de efecto de campo bicapa ZnO/Mg0

• Cristian A Figueroa,[1] María Cecilia Zapata,[1] Germán Bridoux,[1] Jorge M. Ferreyra,[1] Julio Guimpel ,[2] Gladys Nieva,[2] Manuel Villafuerte[1]

[1] *Laboratorio de Física del Sólido, INFINOA (CONICET-UNT), Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología, Universidad Nacional de Tucumán*
[2] *Centro Atómico Bariloche - CONICET, Comisión Nacional de Energía Atómica*

En este trabajo presentamos el estudio de curvas ID (corriente de drenaje) vs VD (tensión de drenaje), para diferentes voltajes de compuerta, aplicados en un transistor de efecto de campo (FET) basado en una bicapa ZnO/Mg0. Este transistor se ha fabricado con un equipo de ablación por láser pulsado (PLD) en el Laboratorio de Física del Sólido (FACET-UNT), empleando la configuración top-gate. El estudio con rayos X demuestra que las capas de ZnO y Mg0 crecieron en forma epitaxial con planos (002) y (111), respectivamente, paralelos a la superficie del sustrato. Las curvas ID vs VD obtenidas, para diferentes voltajes de compuerta, concuerdan con las ecuaciones típicas que describen el comportamiento de los FET. A partir de estas curvas y los ajustes realizados, se encontró una movilidad de portadores μ = 0,8 cm2/Vs que concuerda con el valor obtenido a partir de mediciones de efecto Hall. También se ha obtenido un voltaje umbral V_{TH} = -34,2 V que se explica por la diferencia de polarización de ambos materiales. Cuando el FET se ilumina con luz ultravioleta (UV), se obtiene un valor menor para el voltaje umbral V_{TH} = -43,8V.
Estos hallazgos muestran como las propiedades intrínsecas de óxidos conductores transparentes (TCO) pueden determinar los parámetros característicos de un dispositivo FET.

Propiedades electrónicas y magnéticas de $CrTe_2$: un posible material ferromagnético bidimensional con alta temperatura crítica

• Ruben Oscar Weht[1]

[1] *Departamento de Física de la Materia Condensada, Gerencia de Investigación y Aplicaciones, CAC-CNEA*

Actualmente hay un gran esfuerzo por conseguir materiales ferromagnéticos verdaderamente bidimensionales, de solo unas pocas capas atómicas de espesor, eventualmente una monocapa. Su obtención permitiría nuevos desarrollos en ciencia fundamental pero principalmente muy interesantes aplicaciones en nanotecnología. Hasta hace muy poco tiempo, se pensaba que lograr esto no era posible, debido a la fuerte competencia entre un orden magnético de largo alcance y las fluctuaciones térmicas, muy amplificadas a estas dimensiones reducidas. Sin embargo, en los últimos años se han sintetizado algunos materiales, típicamente calcogenuros, donde la presencia de una importante anisotropía magnética permitió estabilizar el orden magnético. Entre estos ejemplos podemos mencionar los reportes de los aisladores $Cr_2Ge_2Te_6$ y CrI_3 y el conductor Fe_3GeTe_2, pero en todos estos casos las temperaturas de Curie fueron muy bajas. Independientemente de esto, hace ya algunos años participamos en el primer trabajo que logró la síntesis de $CrTe_2$, en su estructura $1T$ [J. Phys.: Condens. Matter 27 (2015) 176002]. Aunque es un material solo marginalmente estable, este compuesto es estructuralmente muy bidimensional, conductor y ferromagnético, con una energía de exfoliación relativamente baja y una temperatura de Curie de 310 K, por sobre la temperatura ambiente. En este trabajo, presentaremos un análisis detallado de sus propiedades electrónicas y magnéticas básicas (densidad de estados, magnetismo, bandas, etc.), sugiriendo su posible utilización como un nuevo material ferromagnético 2D con altas temperaturas de transición. En particular, utilizando métodos de los primeros principios, estudiaremos en detalle la evolución de sus propiedades magnéticas con un número variable de capas, yendo desde el volumen hasta la monocapa, analizando tanto la estabilidad de las diferentes configuraciones magnéticas como su anisotropía, remarcando la importancia de los enlaces químicos involucrados. También mostraremos algunos resultados experimentales recientes, obtenidos por colegas del exterior con quienes colaboramos.

Propiedades electrónicas y catalíticas de grafeno dopado con circonio en medio acuoso

• Victor Miguel Aramburu,[1] Maria Beatriz López,[1] Yesica Celeste Villagrán López,[1] Flavia Emilia Lobo Maza,[1] Carlos Elias Jais,[1] Eliseo Israel Sosa,[1] Facundo Exequiel Closas Aguero[1]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad Nacional de Catamarca*

En este trabajo se utilizan técnicas de modelado computacional basados en la Teoría del Funcional de la Densidad para determinar las propiedades electrónicas y catalíticas de una lámina de grafeno dopada con circonio. Para ello, se emplea el funcional PBE1PBE y los pseudopotenciales LANL2DZ para el átomo metálico y las bases 6-31G+ para los átomos de carbono y oxígeno. En primer lugar, para analizar los efectos del dopado, se compara el valor de la energía de adsorción de oxígeno molecular sobre la lámina de grafeno dopada y con la de una lámina de grafeno puro. Para considerar la incidencia del agua como solvente se utiliza el Modelo Polarizable Continuo. Se estudian las propiedades catalíticas del sistema dopado frente a la adsorción de O2. Los resultados indican que la barrera de disociación de oxígeno disminuye en el sistema dopado respecto a la lámina de grafeno puro y la presencia del solvente promueve una mayor reactividad química. Estos resultados nos permiten inferir que el grafeno dopado con circonio podría considerarse como un posible catalizador de la reacción de reducción de oxigeno (RRO) en dispositivos de almacenamiento y generación de energía.

Estudio de termofluencia y caracterización por espectroscopia mecánica de la aleación de Al13Mg7Si2Cu (% peso) producida por solidificada rápida y extruida en caliente

• Sebastian Greco,[1] Javier Amado,[1] Fabiana Saporiti,[1] Fernando Audebert[1]

[1] *Grupo Materiales Avanzados, INTECIN, Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires y CONICET, Paseo Colon 850, 1063 Buenos Aires, Argentina*

Las aleaciones de base aluminio presentan un alto interés tecnológico en la industria aeronáutica, espacial, y automovilística debido a su baja densidad. En ciertas aplicaciones, tales como en pistones de motores de combustión interna se requieren aleaciones de alta resistencia específica capaces a elevadas temperaturas. En este trabajo se estudia una aleación Al13.5Mg7Si2Cu (% peso) producida por solidificación sápida seguido de extrusión en caliente.
Se realizaron ensayos de tracción uniaxial a diferentes temperaturas (entre 275^oC y 350^oC) y a diferentes velocidades de deformación (entre 10^{-4} y 10^{-2} s^{-1}) para evaluar el comportamiento de termo-fluencia de la aleación. También se estudió el proceso de envejecimiento, la estabilidad de la microestructura y la variación del módulo de Young por espectroscopia mecánica a diferentes temperaturas.
La microestructura fue caracterizada mediante técnicas de microscopía óptica, microscopía electrónica de barrido, energía dispersiva de rayos X, difracción de rayos X y dureza. La microestructura está compuesta por una matriz de α - Al y una fina dispersión de partículas intermetálicas de Al8FeMg3Si6 y Al3FeSi. La variación del módulo de Young sigue el modelo teórico propuesto por Zakarian. Los resultados de termo-fluencia fueron ajustados mediante la ley de potencia, y sugieren mecanismos de deformación basados en el movimiento de dislocaciones.

Estudio teórico comparativo de la adsorción de fluoruros en diferentes óxidos

• Lorena Meier,[1] Cecilia Ines Nora Morgade,[1,2] Ana Belén Schvval,[1,3] Ana Cecilia Rossi Fernández,[4] Silvia Andrea Fuente[1,2]

[1] *IFISUR, Universidad Nacional del Sur, CONICET, Departamento de Física, Av. Alem 1253, 8000 Bahía Blanca, Argentina*
[2] *Universidad Tecnologica Nacional*
[3] *Departamento de Química - Universidad Nacional del Sur*
[4] *Instituto de Química del Sur - Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca*

El anión fluoruro es uno de los contaminantes presentes en aguas de diferentes orígenes en muchas partes del mundo. Entre las diversas tecnologías utilizadas para la defluoruración se han probado algunas basadas en coagulación, precipitación, procesos de membrana, tratamientos electrolíticos e intercambio iónico. También han sido estudiados experimentalmente procesos de adsorción en diferentes materiales, entre los que se encuentran Fe2O3, MgO y TiO2 [1]. Por esta razón, y con la finalidad de buscar la optimización de estos, por su menor costo comparativo se decidió estudiar, en forma teórica y con la metodología DFT [2], la adsorción de fluoruros (NaF en este caso) en dichos óxidos para explicar las interacciones de los mismos a nivel molecular. En todos los casos se modelaron las superficies más estables ((0001) para Fe2O3, (100) para MgO, (101) para TiO2 anatasa y (110) para TiO2 rutilo). Las energías de adsorción obtenidas fueron -3.73 eV para Fe2O3, -2.62 eV para MgO, -2.98 eV para TiO2 anatasa y -3.42 eV para TiO2 rutilo, todas ellas indicativas de afinidad adsortiva. En todos los casos, se observa elongación del enlace Na-F respecto a la molécula libre, siendo más notorio en el caso del Fe2O3. Además, se obtienen valores elevados de bond order entre el átomo de flúor y el metal de la superficie del óxido correspondiente (0.53 para Fe2O3, 0.25 para MgO, 0.35 TiO2 anatasa y 0.29 para TiO2 rutilo). La transferencia de carga electrónica en todos los casos, se produce desde el F al metal a excepción del sistema MgO.

Referencias:

[1] Mirna Habuda-Stanić, Maja Ergović Ravančić and Andrew Flanagan, Materials **7**, 6317 (2014).
[2] Kresse G., and Hafner J., Phys. Rev. B **49**, 14251 (1994).

Propiedades estáticas y dinámicas de electrones acoplados a paredes de dominio en dimensión D=1

• Juan Quiroga,[1] Alejandro Martin Lobos[1]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Cuyo*

La espintrónica es un área emergente que ha despertado gran interés tanto desde el punto de vista fundamental como para el desarrollo de nuevas tecnologías de la información. Recientemente se ha demostrado la posibilidad de manipular paredes de dominio magnéticas usando corrientes polarizadas en espín, lo que podría tener importantes aplicaciones (por ejemplo, en memorias magnéticas basadas en el mecanismo de torque de transferencia de espin (STT-MRAMs [1, 2, 3] o en memorias del tipo 'race track'[4]). El marco teórico usualmente utilizado para comprender la dinámica de estas paredes de domino fuera de equilibrio está dado por la ecuación de Landau-Lifshitz-Gilbert-Slonczewski [5]. Sin embargo, dicha ecuación es de naturaleza fenomenológica y no permite tratar en pie de igualdad la dinámica de los grados de libertad electrónicos y magnéticos, lo que genera muchas preguntas desde el punto de vista teórico (por ejemplo, ¿cuál es la influencia de los espines dinámicos sobre los electrones? ¿cómo evoluciona el dominio magnético frente a un pulso de corriente? [6]).
Motivados por estas interrogantes, en el presente trabajo estudiamos teóricamente la interacción entre una una pared de dominio magnética y los electrones de conducción de un metal en dimensión espacial D=1 desde una perspectiva microscópica. Modelamos la pared de dominio magnética con una cadena de Heisenberg clásica de N espines con anisotropía magnética uniaxial, acoplada mediante una interacción de intercambio de tipo 's-d'a una cadena tight-binding de electrones. Obtenemos las ecuaciones dinámicas del sistema acoplado cadena de espines-cadena electrónica, y las resolvemos de manera autoconsistente. Aquí presentamos resultados preliminares de dicho estudio.

Referencias:

[1] A. Katine and E. E. Fullerton, J. Magn. Magn. Mater. **320**, 1217 (2008).
[2] R. Sbiaa, R. Law, S. Y. H. Lua, E. L. Tan, T. C. Tahmasebi, C. Wang, and S. N. Piramanayagam, Appl. Phys. Lett. **99**, 092506 (2011).
[3] K. L. Wang, J. G. Alzate, and P. Khalili Amiri, J. Phys. D: Appl. Phys. **46**, 074003 (2013).
[4] M. Hayashi, L. Thomas, R. Moriya, C. Rettner, and S. S. P. Parkin, Science **320**, 209 (2008).
[5] J. C. Slonczewski, J. Magn. Magn. Mater. **159**, L1 (1996).
[6] M. D. Petrovic, B. S. Popescu, U. Bajpai, P. Plechác, and B. K. Nikolic, Phys. Rev. App. **10**, 054038 (2018).

Modelado de películas magnéticas multicapa fuertemente anisotrópicas acopladas antiferromagnéticamente

• Jhon Jaither Melo Quintero,[1,2] Marisa Alejandra Bab,[1,2] Gustavo Pablo Saracco[1,2]

[1] *Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), CONICET - UNLP*
[2] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata*

Se estudió el comportamiento magnético de una película multicapa, constituida de dos capas ferromagnéticas fuertemente anisotrópicas acopladas a través de una película no-magnética, centrando la atención en el caso de que el acoplamiento entre las mismas sea antiferromagnético. El sistema fue modelado por dos redes bidimensionales discretas, superpuestas concéntricamente, y para tener en cuenta el espesor de la película no-magnética se varió el valor de la constante de intercambio entre capas. Para considerar la fuerte anisotropía perpendicular al plano de las películas se implementó el modelo de Ising ferromagnético con interacciones dipolares, y se establecieron condiciones de contorno periódicas usando el esquema de Ewalds para disminuir los efectos de tamaño finito. Las interacciones antiferromagnéticas entre capas se consideraron a primeros vecinos. De esta manera, la energía total del modelo depende de las constantes de intercambio y dipolar de cada capa J_1, J_2, g_1 y g_2 respectivamente, y de la constante de acoplamiento entre capas J_3. El comportamiento térmico del modelo se estudió mediante simulaciones Monte Carlo considerando valores de las constantes $J_1 = 1$, $J_2 = 2$, J_3 = -0,5 y -1,5; manteniendo $g_1 = g_2 = 1$, para un amplio intervalo de temperaturas del baño térmico. A temperaturas bajas, se observó que las configuraciones de equilibrio de ambas capas consisten de franjas de espines alternadas de ancho $h_n = 2$, que se acoplan antiferromagnéticamente. Estas configuraciones corresponden al estado fundamental de una monocapa con $J = 2$. En cambio, a temperaturas altas ambas capas se desordenaron, dando lugar a una fase del tipo tetragonal líquida (TL), en donde las franjas se interceptan perpendicularmente entre sí dentro de cada capa. Cabe destacar que las fases descriptas están presentes en el diagrama de fases de la versión monocapa del mismo modelo. A temperaturas aún más altas, el sistema se vuelve paramagnético, y ambas capas no exhiben patrones definidos como en las anteriores.

La transición de fase entre las configuraciones ordenadas y TL se investigó analizando la evolución dinámica en el régimen de tiempos cortos, STD, del parámetro de orden y sus momentos, a partir de configuraciones correspondientes al estado fundamental y al paramagnético. Este análisis permite determinar el orden de la transición, y en el caso de transiciones de segundo orden estimar los exponentes críticos. Los resultados obtenidos sugieren la presencia de una transición de segundo orden entre las fases de franjas y TL, así como la ausencia de la fase intermedia nemática presente en el caso monocapa con $J = 2$. Por su parte, las temperaturas críticas obtenidas fueron mayores a las correspondientes a las transiciones entre $h_n = 1$-TL y NM-TL de las monocapas con $J = 1$ y $J = 2$, respectivamente. Cabe mencionar que la transición NM-TL en la monocapa es del tipo Kosterlitz-Thouless. En consecuencia, el acoplamiento antiferromagnético entre capas ferromagnéticas favorece la estabilidad térmica de la fase de franjas de ancho $h_n = 2$, observándose a temperaturas mayores conforme se incrementa la constante de acoplamiento.

Efecto de la rugosidad sobre la mojabilidad del Ti6Al4V

• Camila Ivon Masoneves,[1] Jonathan Maximiliano Schuster,[1,2,3] Margarita Ester Laczeski,[2] Mario Roberto Rosenberger[1,2]

[1] *Instituto de Materiales de Misiones*
[2] *Facultad de Ciencias Exactas, Químicas y Naturales - Universidad Nacional de Misiones*
[3] *Universidad Nacional del Alto Uruguay*

La mojabilidad es la capacidad que tiene un líquido de extenderse sobre un sólido y se puede determinar a partir del ángulo de contacto (AC). Uno de los métodos para obtener el valor experimental del AC de un líquido sobre una superficie solida es el método de la gota sésil, que consiste en una gota (con volumen en el orden del microlitro) depositada sobre la superficie del sólido. Una gota sésil es un sistema formado por tres fases, el sólido sobre el que se deposita la gota, el líquido que forma la gota y su vapor [1-2]. Estos tres medios forman a su vez tres interfaces: la superficie de la gota (interfaz líquido-vapor) la superficie del sólido mojada (interfaz sólido-líquido) y la superficie del sólido sin mojar (interfaz sólido-vapor). La intersección de estas tres interfaces da lugar a una línea conocida como línea de tres fases o línea de contacto. Se define como el AC, al ángulo que forma la tangente a la interfaz líquido-fluido con la superficie del sólido en el punto de contacto de las tres fases hacia el lado de la fase líquida [2]. Para una superficie ideal el AC será función de las tensiones interfaciales solido-vapor, solido-líquido y liquido-vapor y además presentará simetría axial. Las gotas con simetría axial exhiben un único ángulo de contacto a lo largo de la línea de contacto, esto nos permite atribuir este ángulo a la gota [3]. El alejamiento de las condiciones de superficie ideal (ej.: heterogeneidad química, rugosidad superficial, entre otras) favorecen la aparición de gotas con formas características (alejadas de la simetría axial), el AC en estas gotas varía de manera continua a lo largo de la línea de contacto presentando así una multiplicidad de ángulos de contacto [1-2].
La aleación Ti6Al4V presenta un gran interés en el área biomédica ya que es ampliamente utilizado para la fabricación de prótesis [4]. Se ha reportado que la mojabilidad es uno de los parámetros que influyen en el grado de biocompatibilidad de los biomateriales [4], por lo cual resulta de interés estudiar el efecto que la rugosidad del Ti6Al4V sobre el AC del agua.
Las superficies de Ti6Al4V se sometieron a pulido mecánico con papel abrasivo de SiC. Se obtuvieron 5 terminaciones, una para cada tamaño de grano de los papeles abrasivos utilizados (#320, #500, #1000, #1200 y #1500). Además, para cada una de las terminaciones se obtuvieron terminaciones con textura (rayas de pulido paralelas) y sin textura (rayas de pulido al azar). Los valores de AC se obtuvieron depositando una gota de 2 μL de agua desionizada sobre la superficie de la aleación pulida limpia y seca. Para medir la simetría axial de las gotas sésiles se calculó el coeficiente de asimetría (AS, AS$>$1 para gotas no axisimétricas) [1] a partir de imágenes obtenidas desde arriba. Los parámetros de rugosidad se obtuvieron mediante perfilometría.
Los valores de AC promedio sobre las probetas con textura fueron 44,6º, 41,9º, 48,3º, 58,9º y 44.6º para las terminaciones #320, #500, #1000, #1200 y #1500, respectivamente. La única diferencia estadísticamente significativa (Prueba de Kruskal Wallis) encontrada fue entre los AC en 1200 y las demás. Los valores de AC promedio sobre las probetas sin textura fueron 76,9º, 48,2º, 48,9º, 43,6º y 76,5º para las terminaciones #320, #500, #1000, #1200 y #1500, respectivamente. No hay diferencias estadísticamente significativas entre los AC de #500, #1000 y #1200 ni entre los AC de #320 y #1500, mientras que, si hay diferencias estadísticamente significativas entre ambos grupos. En las probetas con textura el AS promedio tomó valores entre 1,14 a 1,22 (sin diferencias estadísticamente significativas) mientras que en las probetas sin textura el valor de AS más alto se observó en la probeta #1200 (1,20) mientras que en las demás los valores entre 1,09 a 1,14.

Referencias:

[1] J M Schuster *et al.*, Procedia Mater. Sci. **8**, 742 (2015).
[2] J W Drelich *et al.*, Surf. Innov. **8**, 3 (2020).
[3] T S Meiron *et al.*, J. Colloid Interface Sci. **274**, 637 (2004).
[4] L Ponsonnet *et al.*, Mater. Sci. Eng. C, **23**, 551 (2003).

Estudio de la cinética de cristalización de aleaciones amorfas de composición $Sb_{70}Te_{30}$

• Javier Rocca,[1] María Andrea Ureña,[1] Marcelo Raul Fontana[1]

[1] *Universidad de Buenos Aires. Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas. Instituto de Tecnologías y Ciencias de la Ingeniería quot;Hilario Fernández Longquot;. Facultad de Ingeniería. Paseo Colón 850, C1063ACV Buenos Aires, Argentina.*

Una de las aplicaciones más importantes de los vidrios calcogenuros es su utilización como memorias de cambio de fase (phase change memories, PCM). El funcionamiento de estas memorias no volátiles se basa en usar el contraste en la resistencia eléctrica entre los estados amorfo y cristalino, destacándose la aleación $Sb_{70}Te_{30}$ (en porcentaje atómico) entre los materiales calcogenuros con estas propiedades. En trabajos previos, encontramos que películas delgadas de composición $Sb_{70}Te_{30}$ muestran una fuerte caída de la resistencia en un rango de temperatura estrecho en la transición amorfo-cristal. El conocimiento de los mecanismos microscópicos de la cristalización de aleaciones amorfas permite el control microestructural para optimizar las propiedades. En particular el funcionamiento de las memorias se puede mejorar logrando el cabal entendimiento de la cinética de cristalización. En este trabajo se presentan los resultados obtenidos en este campo a partir de mediciones de calorimetría diferencial de barrido (DSC) de películas delgadas obtenidas por ablación laser (PLD) utilizando un láser de Nd:YAG. La fracción transformada, así como la velocidad de transformación en función de la velocidad de calentamiento son reportadas. Los diagramas de transformación TTT y THrT son calculados. También se reportan las distintas fases cristalizadas a partir de medidas de difracción de rayos X. Se determinan las temperaturas y las entalpías de cristalización, así como las energías de activación de cada proceso.

Modelado de sistemas magnéticos frustrados usando redes neuronales

• Inés Raquel Corte,[1,2] Carlos A. Lamas,[1,3] Marcelo Arlego[3]

[1] *Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata*
[2] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata*
[3] *Instituto de Física La Plata, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP - CONICET*

En este trabajo se implementaron redes neuronales con el fin de detectar transiciones de fase del modelo de Ising en distintas redes en presencia de acoplamientos a primeros vecinos (J) y/o a segundos vecinos (J2). Los datos de entrenamiento utilizados corresponden a las configuraciones de espín de redes de L2 sitios (L = 10, 20, 30) obtenidas mediante simulaciones de Monte Carlo. Se estudió específicamente el modelo de Ising antiferromagnético J = J2 con J = 1 en función del acoplamiento a segundos vecinos J2 en la red cuadrada. Se entrenaron redes neuronales convolucionales con configuraciones asociadas a un dado acoplamiento J2 para realizar un procedimiento de transferencia de conocimiento que denominamos "model transfer" y estimar la temperatura de transición de modelos de Ising con J2 distinto. Con estos resultados se pudo reconstruir el diagrama de fases del sistema, y al compararlo con el diagrama obtenido con simulaciones de alta precisión encontramos un notable acuerdo entre ambos. Finalmente se utilizó una técnica llamada "confusion", que permite realizar una clasificación binaria de los datos sin tener información previa del sistema, para observar la existencia de configuraciones con patrones distintos por debajo y por encima de J2 = J=2 a temperaturas cercanas a cero. Esto es un indicio de la transición a bajas temperaturas que ocurre para J2 = J=2, y es consistente con el diagrama de fases antes mencionado.

Modelado de la adsorción de CO2 en superficies de hierro con defectos topológicos

• Ana Cecilia Rossi Fernández,[1] Lorena Alejandra Meier,[2] Silvia Andrea Fuente,[2,3] Carolina Edith Zubieta,[1] Patricia Gabriela Belelli,[2] Ricardo Mario Ferullo[1]

[1] *Instituto de Química del Sur - Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca*
[2] *IFISUR, Universidad Nacional del Sur, CONICET, Departamento de Física, Av. Alem 1253, 8000 Bahía Blanca, Argentina*
[3] *Universidad Tecnologica Nacional*

Es bien sabido que la eliminación de dióxido de carbono (CO2) a la atmósfera constituye un grave problema ambiental que requiere una urgente solución. Una de las formas de disminuir su presencia es utilizarlo como materia prima para la obtención catalítica de productos químicos de utilidad. Para ello, la ruptura de uno de los enlaces C-O suele ser la etapa limitante de la velocidad de reacción. La molécula interacciona con la superficie tomando carga de la misma y activándola, es decir, generando un alargamiento de uno de los enlaces C-O. Analizamos la interacción de CO2 en Fe en los siguientes casos: la cara Fe(100), un defecto superficial simple agregando un adátomo de Fe en Fe(100) y la superficie escalonada Fe(310). Utilizamos la teoría del funcional de la densidad (DFT) empleando el funcional PBE, mediante el código VASP que usa la aproximación de slabs para representar superficies extendidas. Sobre Fe(100) encontramos cuatro modos de adsorción; el más estable presenta una energía de adsorción (Eads) de 1.03 eV el cual, a su vez, tiene el enlace C-O más activado (1.351 Å frente a 1.176 Å de la molécula libre). Al agregarle un adátomo de Fe, el número de modos asciende a ocho, con un rango de Eads entre 0.50 y 1.14 eV. Llamativamente, para esta situación los estados menos estables son los que tienen las moléculas más activadas. Para Fe(310) se encontraron cinco formas, en el rango de Eads entre 0.64 y 1.11 eV; una de la situaciones más estables posee el estado más activado (con una distancia C-O de 1.355 Å). La barrera de activación para la ruptura de uno de los enlaces C-O desde los estados más estables baja de 0.89 eV en Fe(100) a 0.66 eV en Fe(100) con el adátomo de Fe. En general, se observa que cuanto más carga toma el CO2, más se activa uno de sus enlaces.

Determinación variacional de matrices de densidad reducida de dos electrones de estados fundamentales y excitados en el espacio de configuraciones doblemente ocupadas

• Elías Ríos,[1] Diego R. Alcoba,[2,3] Ofelia B. Oña,[1] Pablo Capuzzi,[2,3] Alicia Torre,[4] Luis Lain,[4] Gustavo E. Massaccesi,[5] Alvaro Rubio-García,[6] Jorge Dukelsky[6]

[1] *Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas, Universidad Nacional de la Plata, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Diag. 113 y 64 (S/N), Sucursal 4, CC 16, 1900 La Plata, Argentina.*
[2] *Instituto de Física de Buenos Aires, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Ciudad Universitaria, 428 Buenos Aires, Argentina.*
[3] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, 1428 Buenos Aires, Argentina.*
[4] *Departamento de Química Física, Facultad de Ciencia y Tecnología, Universidad del País Vasco. Apdo. 644, E-48080 Bilbao, España.*
[5] *Departamento de Ciencias Exactas, Ciclo Básico Común, Universidad de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, 1428 Buenos Aires, Argentina.*
[6] *Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Serrano 123, 28006 Madrid, España.*

El método variacional constituye uno de los procedimientos más importantes para aproximar los elementos de las matrices de densidad reducida de dos partículas correspondientes a un sistema de N electrones. Esta técnica requiere que los elementos de dichas matrices satisfagan ciertas restricciones, conocidas como condiciones de N-representabilidad, que garantizan el significado físico de las matrices aproximadas. En trabajos previos [1-4] se obtuvieron resultados muy prometedores en sistemas descritos por funciones de onda de interacción de configuraciones doblemente ocupadas (o funciones de onda de número de senioridad cero), mediante un método variacional que impone las llamadas condiciones de p-positividad. Se demostró que la mayor parte de la correlación fuerte es recogida por ese procedimiento, en el que el problema de optimización correspondiente se formula como un programa semidefinido eficiente. En este trabajo presentamos una mejora de ese método [5], basada en la técnica del operador de dispersión, que permite una determinación variacional de los elementos de las matrices de densidad reducida de dos electrones correspondientes a los estados fundamentales y excitados de sistemas interactuantes de N electrones. El procedimiento amplía la propuesta previamente publicada [6] a Hamiltonianos de interacción de dos partículas y a las condiciones de N-representabilidad correspondientes a las matrices de densidad reducida de dos, tres y cuatro partículas, en el espacio de interacción de configuraciones doblemente ocupadas. El tratamiento se ha aplicado a la descripción de espectros electrónicos utilizando dos modelos de apareamiento de referencia exactamente resolubles: el Hamiltoniano reducido de Bardeen-Cooper-Schrieffer y el de Richardson-Gaudin-Kitaev. Se muestra que el operador de dispersión, combinado con condiciones de N-representabilidad de matrices de densidad reducida de hasta cuatro partículas, proporciona excelentes resultados.

Referencias:

[1] W. Poelmans, M. Van Raemdonck, B. Verstichel, S. De Baerdemacker, A. Torre, L. Lain, G.E. Massaccesi, D.R. Alcoba, P. Bultinck, and D. Van Neck, J. Chem. Theory Comput. **11**, 4064 (2015).
[2] A. Rubio-García, D.R. Alcoba, P. Capuzzi, and J. Dukelsky, J. Chem. Theory Comput. **14**, 4183 (2018).
[3] D.R. Alcoba, P. Capuzzi, A. Rubio-García, J. Dukelsky, G.E. Massaccesi, O.B. Oña, A. Torre, and L. Lain, J. Chem. Phys. **149**, 194105 (2018).
[4] G.E. Massaccesi, A. Rubio-García, P. Capuzzi, E. Ríos, O.B. Oña, J. Dukelsky, L. Lain, A. Torre, and D.R. Alcoba, J. Stat. Mech. 013110 (2021).
[5] D.R. Alcoba, O.B. Oña, L. Lain, A. Torre, P. Capuzzi, G.E. Massaccesi, E. Ríos, A. Rubio-García, and J. Dukelsky, J. Chem. Phys. **154**, 224104 (2021).
[6] M. Nakata, B.J. Braams, M. Fukuda, J.K. Percus, M. Yamashita, and Z. Zhao, J. Chem. Phys. **125**, 244109 (2006).

Ruptura dinámica de balance detallado debido a fuerzas inducidas por corriente

• Erika L. Mehring ,[1,2] Raúl A. Bustos-Marún,[1,2,3] Hernán L. Calvo[1,2]

[1] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*
[2] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*
[3] *Facultad de Ciencias Químicas - Universidad Nacional de Córdoba*

En este trabajo analizamos los efectos dinámicos de las fuerzas inducidas por corriente [1] en un punto cuántico acoplado a un modo vibracional longitudinal. Para ello, modelamos la configuración de transporte a través de una cadena unidimensional tight-binding con condiciones de borde absorbentes y calculamos la evolución de ondas planas inyectadas en las proximidades del punto cuántico. El punto cuántico puede moverse en la dirección de la corriente, y su acoplamiento con los contactos depende de su posición. El mismo, además, está sujeto a fuerzas inducidas por corriente y a fuerzas armónicas clásicas. Calculamos la dinámica completa dependiente del tiempo para todo el sistema, empleando una combinación de la fórmula Trotter-Suzuki [2] para los electrones y el método Runge-Kutta para la posición del punto cuántico. Este cálculo exacto se comparó con las soluciones de estado estacionario obtenido por 1) el formalismo de funciones de Green de noequilibrio en el regimen adiabático [3] y 2) la aproximación estacionaria de la ecuación de Schrödinger [4]. Encontramos que todas las soluciones convergen bajo condiciones apropiadas de adiabaticidad, estableciendo las bases para el análisis de efectos no adiabáticos para fuerzas inducidas por corriente en este tipo de sistemas. Posteriormente, encontramos condiciones de parámetros donde el punto cuántico se mueve hacia una nueva posición de equilibrio debido al paso de la corriente a través del sistema. Debido a que esta nueva posición depende fuertemente de la dirección de la corriente, el dispositivo muestra una ruptura de balance detallado [4] generando una asimetría en la conductancia efectiva.

Referencias:

[1] N. Bode *et al.*, Phys. Rev. Lett. **107**, 036804 (2011).
[2] H. De Raedt and B. De Raedt, Phys. Rev. A **28**, 3575 (1983).
[3] S. E. Deghi *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter **33**, 175303 (2021).
[4] H. M. Pastawski and E. Medina, Rev. Mex. Fís. **47**, 1 (2001).

Propiedades volumétricas y velocidad del sonido para el sistema valeronitrilo + acetato de etilo, a diversas temperaturas

• Mirtha Orozco,[1] Salvador Canzonieri,[1] Alberto Camacho,[1] Alejandra Mariano[1]

[1] *Facultad de Ingeniería. Universidad Nacional del Comahue. Instituto de Investigación en Tecnologías y Ciencias de la Ingeniería (IITCI) Conicet-UNCo.*

Como parte de nuestro programa de investigación estamos realizando un estudio sistemático de propiedades termo físicas a presión atmosférica de mezclas binarias y ternarias de esteres con nitrilos en función de temperatura, composición y longitud de la cadena molecular, ya que los alcanonitrilos y los alquilacetatos son muy buenos solventes para polímeros, y sus mezclas pueden ser también buenos solventes para materiales poliméricos. Además, el estudio de las propiedades termodinámicas de exceso ofrece un medio conveniente para interpretar la relación entre las propiedades experimentales macroscópicas de las mezclas y la interacción microscópica entre moléculas iguales y distintas. En este trabajo se reportan datos experimentales de densidad y velocidad del sonido para el sistema valeronitrilo + acetato de etilo, en todo el rango de concentración a presión atmosférica. Tanto la densidad como la velocidad del sonido, sus datos cubren un rango importante de temperaturas entre 278,15 K y 318,15 K, con un paso de 5 K.

Los productos químicos empleados en este trabajo fueron suministrados por Aldrich. La pureza de los mismos fue superior a 99 porciento. Los líquidos se secaron por medio de tamices moleculares de 0,4 nm de Fluka, y fueron desgasificados antes de su empleo en un baño de ultrasonidos. La densidad y la velocidad del sonido se midieron con un densímetro digital de tubo vibrante Anton Paar DSA-48.

A partir de los datos de densidad se determinó, el volumen molar (V) y la magnitud de exceso de esta propiedad (VE). Las desviaciones de la velocidad del sonido se calcularon a partir de medidas de la velocidad del sonido. Las desviaciones y las magnitudes de exceso fueron ajustadas a una ecuación polinómica del tipo Redlich- Kister en función de la concentración a la temperatura de trabajo. El volumen molar de exceso muestra valores positivos en todo el rango de concentración y a todas las temperaturas, mientras que los valores de la desviación de la velocidad del sonido de las mezclas muestra valores negativos en todo el rango de concentración. Los signos de las desviaciones de la velocidad del sonido y del volumen de exceso están en concordancia con la bibliografía. Volúmenes de exceso positivos, son compatibles con la suposición del predominio de fuerzas repulsivas y/o efectos geométricos que permiten la las expansión de las moléculas, resultando una estructura líquida menos densa.

Estudio teórico-experimental de conductores iónicos con estructura tipo Garnet

• Damián E. Magnelli,[1] Magalí C. Molina,[2] Gabriela F. Cabeza,[1,3] Marisa A. Frechero[2]

[1] *Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur*
[2] *GFCIES. Departamento de Química, Universidad Nacional del Sur. INQUISURCONICET*
[3] *Instituto de Física del Sur - Universidad Nacional del Sur*

El $Li_7La_3Zr_2O_{12}$ con estructura de tipo garnet es un gran candidato como electrolito sólido para baterías de estado sólido debido a su elevada conductividad iónica ($10^{-3}Scm^{-1}$ a temperatura ambiente) [1]. Sin embargo, presenta una elevada resistencia en la interfaz electrodo/electrolito debido a su morfología rígida. El LLZO cristaliza en dos fases estables: una cúbica con una distribución desordenada de Li^+ y otra tetragonal, con una distribución ordenada (cuya conductividad es dos órdenes de magnitud menor que la forma cúbica). A partir del dopado con Ce^{4+} buscamos inducir la estabilidad de la forma cúbica, incrementando la movilidad de los cationes e inclusive minimizar la necesidad del uso de lantano debido a su elevado costo. Para esto seguimos dos caminos: el experimental, en el que sintetizamos el LLZO dopado con cerio por molienda mecánica y tratamiento térmico a partir de ZrO_2, CeO_2, La_2O_3 y Li_2CO_3 y otro teórico computacional empleando el código comercial VASP (Vienna ab-initio simulation package) como método de cálculo dentro del formalismo de la Teoría de la Funcional Densidad (DFT) [2]. Para el diseño teórico de este material modelamos la estructura de la circonia (ZrO_2) estequiométrica en sus fases cúbica y monoclínica y dopada sustitucionalmente con Ce con el objetivo de analizar los cambios producidos por la presencia del dopante. En este trabajo presentamos los resultados experimentales del proceso de síntesis optimizado junto a su caracterización estructural y los resultados del procedimiento seguido en la simulación para la construcción del sistema a partir de sus componentes procurando imitar el método de síntesis elegido para comprender las transformaciones intermedias que llevan al material buscado.

Referencias:

[1] A. J. Samson, K. Hofstetter, S. Bag and V. Thangadurai, Energy Environ Sci. **12**, 2957 (2019).
[2] G. Kresse, J. Furthmüller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).

Adsorción de CO sobre el sistema Pt_{13}-TiO_2(110): un estudio teórico

• Abel S. Maldonado,[1,2] Susana B. Ramos,[1,2] Gabriela F. Cabeza[3,4]

[1] *Instituto de Investigación y Desarrollo en Ingeniería de Procesos, Biotecnología y Energías Alternativas*
[2] *Facultad de Ingeniería - Universidad Nacional del Comahue*
[3] *Instituto de Física del Sur - Universidad Nacional del Sur*
[4] *Departamento de Física - Universidad Nacional del Sur*

Las partículas subnanométricas de platino son actualmente de gran interés por sus aplicaciones tecnológicas en celdas de combustible, en convertidores catalíticos y para la conversión de CO en CO_2, entre otras. Depositadas sobre soportes óxidos como rutilo TiO_2 juegan un rol importante en el diseño de catalizadores modelo en catálisis heterogénea. En este trabajo estudiamos la estructura y energética de clústeres de Pt_{13} depositados sobre $TiO_2(110)$ en vistas a la reacción de CO a CO_2 mediada por este sistema. Utilizamos el código VASP [1] que realiza cálculos ab initio basados en la teoría de la funcional densidad (DFT) corrigiendo las interacciones coulombianas a través de la contribución de Hubbard (DFT+U). Estudios previos utilizando esta metodología nos permitieron determinar las configuraciones de equilibrio de los clústeres aislados, los cuales experimentan una fuerte reestructuración respecto de las configuraciones más compactas y simétricas, octaédricas e icosaédricas [2,3]. En este trabajo examinamos el sistema Pt_{13}-rutilo para caracterizar la interacción cluster/sustrato para el caso de la superficie reducida previamente estudiada en relación al sistema Pt_4-rutilo. Determinamos las geometrías de equilibrio, energías de adsorción, efectos de transferencia de carga y densidad electrónica de estados. Encontramos que al depositar un cluster de Pt_{13} octaédrico sobre la superficie de rutilo éste se deforma fuertemente adoptando una estructura en forma de capas, similar a la que adopta el cluster libre; de esta manera el cluster se oxida, logra incrementar la interacción con la superficie y se da lugar a una alta energía de adsorcion. Luego estudiamos la adsorción de CO sobre el cluster de Pt, investigando los sitios más óptimos para la adsorción de esta molécula, y analizando la posible oxidación del CO por un oxígeno de la superficie.

Referencias:

[1] G. Kresse, and J. Furthmüller, Comput. Mater. Sci. **6**, 15 (1996).
[2] A. S. Maldonado, G. F. Cabeza, and S. B. Ramos. J. Phys. Chem. Solids **131**, 131 (2019).
[3] A. S. Maldonado, G. F. Cabeza, and S. B. Ramos. Top. Catal. **62**, 989 (2019).

Efecto del coeficiente U de Hubbard sobre las propiedades ópticas y cargas de los semiconductores TiO2 y el ZnO

• Ana Cecilia Rossi Fernández,[1] Lorena Meier,[2] Ana Belén Schvval,[2,3] María Julia Jiménez,[2] Gabriela Fernanda Cabeza,[2] Cecilia Ines Nora Morgade[2,4]

[1] *INQUISUR - Dpto. Química - Universidad Nacional del Sur*
[2] *IFISUR, Universidad Nacional del Sur, CONICET, Departamento de Física, Av. Alem 1253, 8000 Bahía Blanca, Argentina*
[3] *Departamento de Química - Universidad Nacional del Sur*
[4] *Universidad Tecnologica Nacional*

Las nanoestructuras de semiconductores como el TiO2 y el ZnO han demostrado ser capaces de mediar la oxidación fotocatalítica de contaminantes orgánicos para su eliminación del agua. Por eso es interesante la descripción correcta de sus propiedades electrónicas y ópticas. La Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)1) suele subestimar por ejemplo el ancho de banda prohibida (BG) de estos óxidos. Entonces para resolver los errores de auto-interacción para materiales de electrones fuertemente correlacionados se utiliza el método conocido como DFT + U2). Este método impone un coeficiente U, de Hubbard, de funcional tipo Coulomb para la representación correcta de los orbitales d de metales de transición como el Ti y el Zn. En el presente trabajo teórico se pudo evaluar como el factor U utilizado afecta las distintas propiedades ópticas y la carga de los átomos. Se pudieron calcular las partes imaginarias y reales de la función dieléctrica, reflectividad R (ω), Índice de refracción n (ω), coeficiente de extinción k (ω), coeficiente de absorción α (ω) y la función de pérdida de energía de electrones L (ω). Es importante destacar que las curvas obtenidas considerando la inclusión del parámetro U aplicado a los orbitales d muestran un excelente acuerdo con los datos reportados experimentalmente. Con respecto al efecto sobre las cargas, se pudo determinar que en TiO2 (anatasa o rutilo) el volumen de la esfera con la que se calculan las cargas de Bader aumenta con el valor del U, mientras que en ZnO ocurre lo opuesto.

Referencias:

[1] Hohenberg, H., and Kohn, W., Phys. Rev. B **136**, 864 (1964).
[2] Anisimovy, V., Aryasetiawanz, F., and Lichtensteinx A. I., J. Phys. Condens. Matter **9**, 767 (1997).

Análisis de las tensiones residuales mediante difracción de neutrones en soldaduras por difusión en aceros ferríticos y bainíticos

• Nicolas Di Luozzo,[1] S Cabeza,[2] Marcelo Raul Fontana[1]

[1] *Universidad de Buenos Aires. Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas. Instituto de Tecnologías y Ciencias de la Ingeniería quot;Hilario Fernández Longquot;. Facultad de Ingeniería. Paseo Colón 850, C1063ACV Buenos Aires, Argentina.*
[2] *Instituto Laue-Langevin (ILL), Grenoble, Francia*

Las soldaduras por difusión mediante una fase líquida transitoria (Transient Liquid Phase Bonding, TLPB) se llevan a cabo calentando la juntura hasta la temperatura de proceso, manteniendo esta temperatura para dar lugar al proceso de interdifusión entre los elementos aleantes del material de aporte y del metal base, y enfriando la juntura hasta temperatura ambiente. Estas soldaduras se caracterizan por realizar el aporte de calor de manera simultánea en un volumen que comprende tanto la juntura como la zona afectada por el calor (ZAC). Teniendo en cuenta lo anterior, con sólo permitir que la etapa de enfriamiento se realice por convección natural, la misma insume un tiempo en el rango de las decenas de minutos. Esto difiere completamente de lo que ocurre en la mayoría de los procesos de soldadura por arco eléctrico, donde el aporte de calor se realiza de manera prácticamente puntual, dando lugar tanto a fuertes gradientes térmicos como velocidades de enfriamiento. En todos los procesos de soldaduras, las tensiones residuales (TR) - es decir las tensiones debidas al proceso de manufactura de una pieza - se desarrollan durante el enfriamiento debido a gradientes térmicos y/o variaciones en el volumen específico debido a transformaciones de fase. Teniendo en cuenta lo anterior, las soldaduras TLPB tienen un área de oportunidad para desarrollar TR inferiores a las de los procesos de soldadura por arco eléctrico - con máximos que prácticamente alcanzan la tensión de fluencia del metal base. A tal fin, se realizó un escaneo de las TR en piezas soldadas por el proceso TLPB que comprende la juntura y la ZAC. Este escaneo se llevó a cabo mediante difracción de neutrones, teniendo presente su capacidad de penetración en metales en el orden de las decenas de mm. De esta manera se pudo medir las TR tanto en la proximidad de la superficie exterior como en el núcleo de las piezas soldadas. En particular, se estudiaron soldaduras de barras de aceros ferrítico y de baja aleación - ASTM A108 1011 y 4140 respectivamente, de 25 mm de diámetro. A su vez, como material de aporte se utilizaron cintas metálicas amorfas del sistema Fe-Si-B. Las TR se obtuvieron a partir de la medición de las deformaciones elásticas del plano (211) del Fe en la dirección radial, circunferencial y axial de las barras, utilizando una longitud de onda de 1.71713 Å y un volumen de interacción de 2x2x2 mm^3.
El principal objetivo de este trabajo es analizar el alcance que tiene el aporte de calor de manera simultánea en toda la juntura - y su consecuente reducción en la velocidad de enfriamiento - para reducir las TR. Esto se debe a que, si bien favorecemos la reducción de gradientes térmicos en la pieza soldada, no necesariamente se tiene el mismo efecto en las TR que se originan durante la transformación de austenita en ferrita + perlita y en bainíta + martensita, para los grados de acero 1010 y 4140 respectivamente.

Estudio de las propiedades termomecanicas y microestructurales luego de un tratamiento de recuperación en CuAlNi envejecido

• Micaela Mosquera Panizo,[1] Fran de Castro Bubani,[2,3,4] Adriana Condo,[2,3,4] Rosana Gastien[5]

[1] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*
[2] *CONICET*
[3] *Grupo Física de Metales, Gerencia Física, Comisión Nacional de Energía Atómica, Centro Atómico Bariloche*
[4] *Instituto Balseiro - Universidad Nacional de Cuyo*
[5] *Departamento de Investigaciones en Sólidos CITEDEF-UNIDEF (CONICET-MINDEF)*

El efecto memoria de forma es una propiedad que poseen determinadas aleaciones y que ha despertado interés científico y tecnológico en los últimos años. Estas aleaciones presentan un comportamiento termo-mecánico muy diferente al resto de los metales convencionales, ya que tienen la capacidad de cambiar su forma mediante la aplicación de un estímulo externo, pudiendo recuperar reversiblemente su forma original.
Ciertas aleaciones de CuAlNi con composición química cercana a Cu-14.3Al-4.1Ni (%peso) pertenecen a la categoría de materiales con efecto memoria de forma, siendo potencialmente útiles como sensores y actuadores a temperaturas superiores a ambiente.
A altas temperaturas, las aleaciones se encuentran en fase β, de estructura cúbica centrada en el cuerpo (bcc) y sin orden. Esta fase puede ser obtenida, a temperatura ambiente, de forma meta-estable parcialmente ordenada a segundos vecinos mediante un recocido a 930°C más un posterior templado en agua y hielo. En ellas es posible inducir una transformación de fase de primer orden, no difusiva y reversible llamada transformación martensítica (TM), que puede inducirse por enfriamiento o por aplicación de carga mecánica.
Debido a la baja cinética de difusión que presentan estas aleaciones a temperaturas superiores a ambiente en comparación con otras aleaciones base Cu con efecto memoria, resultan potencialmente útiles como sensores y/o actuadores en esos rangos de temperatura. Por esta razón es fundamental conocer el comportamiento de las propiedades físicas de las mismas a medida que son sometidas a tratamientos de envejecimiento.
Cuando la aleación es sometida a tratamientos térmicos (TTs) de envejecimiento a temperaturas lo suficientemente altas para favorecer la difusión atómica, es posible que los procesos de ordenamiento continúen, así como también la precipitación de la fase estable γ. Al acumular tiempo de envejecimiento en la muestra, ocurre una disminución en la tensión crítica de transformación de la aleación y un aumento en las temperaturas críticas de transformación hasta que las propiedades de la aleación alcanzan un comportamiento asintótico. Mediante un tratamiento de recuperación (TR), que consiste en un recocido a 930°C y posterior templado en agua y hielo, es posible recuperar valores de temperatura y de tensión de transformación similares a los de la muestra virgen. Sin embargo, la muestra no necesariamente recupera su microestructura original.
El presente trabajo tiene como objetivo estudiar las propiedades termomecánicas y microestructurales de una aleación Cu-14.3Al-4.1Ni (%peso) sometida a un TR luego de haber alcanzado su estado de comportamiento asintótico a causa de TTs a 200°C. Se compara la respuesta termomecánica del material virgen y luego de TR, correlacionándose los resultados obtenidos con los defectos microestructurales de la muestra observados a partir de imágenes obtenidas en un microscopio electrónico de transmisión.

Intercambio de carga en colisiones de iones H+ con superficies bidimensionales con impurezas alcalinas adsorbidas

• Marcelo Romero,[1] Evelina García[1]

[1] *Instituto de Física del Litoral (UNL-CONICET)*

Se estudian los procesos de intercambio de carga en colisiones de H+ con superficies bidimensionales con impurezas alcalinas. Desde el punto de vista adiabático, se estudia la adsorción de metales alcalinos Na, K y Cs (en el límite de bajo recubrimiento) sobre una superficie de grafeno. En el modelo teórico se incluye la repulsión Coulombiana en el orbital de valencia tipo-s del alcalino. Se calculan las densidades de estados proyectadas en el átomo alcalino, así como también las proyectadas en los átomos de carbono próximos a la impureza (modificadas por la presencia del adsorbato), incluyendo los estados internos del adsorbato que resuenan con la banda del grafeno. Desde el punto de vista dinámico, la matriz densidad así obtenida para el sistema grafeno+alcalino se usa en el estudio del intercambio de carga en la colisión binaria entre H+ -átomo alcalino, y entre H+ -átomos de carbono vecinos próximos al adsorbato. La repulsión coulombiana en el estado 1s del H también es incluida. En ambos procesos (adsorción y colisión binaria), el sistema interactuante se describe con el Hamiltoniano de Anderson cuyos términos se calculan a partir de las propiedades químicas de los átomos interactuantes y de la naturaleza extendida de la superficie de grafeno. Las cantidades físicas de interés (ocupaciones, densidades de estados, fracciones de carga, etc) se obtienen utilizando el formalismo de funciones de Green-Keldysh y el método de ecuaciones de movimiento hasta un segundo orden en el acoplamiento del estado localizado con la banda. . Cuando la dispersión es por el adsorbato, encontramos que los átomos de C no contribuyen al proceso de intercambio de carga frontal H+ - adsorbato, y en los casos de K y Cs, los estados internos 3p-K y 5p-Cs, ensanchados por la interacción con la superficie de grafeno, proveen una importante fuente de electrones para la ionización negativa del H, el cual también es promovido por la presencia de los estados internos 3s-K y 5s-Cs. La probabilidad de los tres estados de carga correlacionados del H en función de la energía incidente del proyectil muestra un comportamiento oscilatorio típico de la interacción con bandas estrechas. En particular en la dispersión por un átomo de Na, al no tener un estado interno resonando con la banda de grafeno el comportamiento es diferente, se observan oscilaciones a bajas energías y luego un crecimiento prácticamente monótono de las fracciones de carga. En la dispersión por los diferentes átomos de C vecinos al adsorbato, se observan oscilaciones de las fracciones de carga de H en función de la energía incidente, estando este comportamiento directamente relacionado con la estructura electrónica localizada introducida en la densidad de estados debido a la la presencia de los adsorbatos.

Influencia de la atmosfera de calentamiento en la formación de nanoespecies en SBA-15 por medio de impregnación con Fe(NO3)3.9H2O

• Natalia I. Cuello,[1,2] Rubén Mutal,[3] Sebastián García,[3] Verónica Elías,[4] Marcos I. Oliva[5]

[1] *1- Centro de Investigación y Tecnología Química (CITeQ) (UTN-CONICET), Facultad Regional Córdoba*
[2] *CiTeQ - Facultad Regional Córdoba, Universidad Tecnológica Nacional*
[3] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*
[4] *Centro de Investigación y Tecnología Química-CONICET-UTN*
[5] *Grupo de Ciencia de Materiales FaMAF, IFEG CONICET*

El tamiz molecular mesoporoso libre de metales SBA-15 se sintetizó como hospedador de cationes metálicos mediante el método de impregnación húmeda usando una solución etanólica y un precursor metálico para alcanzar una carga nominal de Fe del 10% en peso. Se usó como precursor Fe(NO3)3.9H2O, luego se dividió el material en dos alícuotas. Se sometieron a calentamiento a 500 °C durante 6 horas en atmosfera de N2 (S-N2) y en aire (S-Aire) respectivamente. Para comprobar la formación de distintas especies de hierro según el método utilizado se midieron las propiedades magnéticas de ambas muestras. La medida de ciclos de histéresis a temperatura ambiente muestra que la magnetización es notablemente mayor para la muestra calentada en atmosfera inerte. Por la metodología de síntesis se descarta la posibilidad de la formación de magnetita, en esta muestra, por lo que se presupone la formación de maghemita o hematita. Luego, la dependencia de la magnetización respecto de la temperatura por medio de protocolos ZFC y FC, expone que la muestra S-Aire forma nanoespecies de hierro de tamaño suficientemente pequeños para entrar en régimen superparamagnetico a temperatura ambiente mientras que las formadas en la muestra S-N2 son de gran variedad de tamaños. Del análisis de estas mediciones se corroboró la variación en las distintas especies metálicas formadas dependiendo de la atmosfera de calentamiento con las consecuentes variaciones en sus propiedades. Esto conlleva a potenciales aplicaciones en distintas áreas de la nanotecnología evidenciado en un aumento en el interés en el estudio de las propiedades magnéticas a nanoescala.

Transición de Estructura columnar a Equiaxial en Aleaciones Aluminio-Níquel

• Roberto Samuel Rozicki,[1] Alex Iván Kociubczyk,[1] Alicia Esther Ares[1]

[1] *Universidad Nacional de Misiones (UNaM). Facultad de Ciencias Exactas, Químicas y Naturales (FCEQyN). Instituto de Materiales de Misiones (IMAM). Programa de Materiales y Fisicoquímica (ProMyF).*

En el presente trabajo tiene como objetivo el estudio de la solidificación direccional en forma vertical ascendente de aleaciones Aluminio-Níquel, relacionando la dependencia de la microdureza en los parámetros de solidificación y los parámetros microestructurales. En el método de trabajo se correlacionan las temperaturas máximas alcanzadas por el sistema antes de iniciar el proceso de solidificación, los gradientes de temperatura, las velocidades de enfriamiento, las temperaturas de liquidus y solidus, los tiempos de solidificación local en las posiciones de cada termocupla y el perfil de los frentes de solidificación. En las probetas solidificadas se observa la forma de los granos obtenidos (columnares, equiaxiales o con transición de estructura columnar a equiaxial), se determina el tamaño de los mismos y se realiza ensayos de microdureza en cada zona identificada. Finalmente, para la obtención de los resultados se establecen correlaciones entre la microdureza con la variación de los parámetros térmicos y la estructura de los granos columnares, equiaxiales y con transición de estructura columnar a equiaxial (TCE).

Aleaciones Al-Si Solidificadas Direccionalmente: El Fenómeno de Transición de Estructura Columnar a Equiaxial

• Edgar Rolando Ibañez,[1] Paula Regina Alonso,[2] Alicia Esther Ares[1]

[1] *Universidad Nacional de Misiones (UNaM). Facultad de Ciencias Exactas, Químicas y Naturales (FCEQyN). Instituto de Materiales de Misiones (IMAM). Programa de Materiales y Fisicoquímica (ProMyF).*
[2] *Centro Atómico Constituyentes, Comisión Nacional de Energía Atómica*

El proceso desde el estado fundido (líquido) a un estado sólido. Es un importante proceso industrial ya que muchos metales se funden para moldearlos hasta darles una forma acabada o semiacabada. En el presente trabajo se realiza un estudio de la influencia de los parámetros térmicos de solidificación (velocidad de enfriamiento y gradiente térmico) sobre la macroestructura y microestructura de las aleaciones Aluminio-Silicio (Al-Si) solidificadas direccionalmente ,en el rango de concentraciones del uno al seis porciento de silicio (porcentajes en peso). Se efectúan experiencias empleando diferentes valores de velocidades de enfriamiento y gradientes de temperatura. La macroestructura se estudia mediante la observación a simple vista de los granos y la medición del tamaño de los mismos mediante la norma ASTM E 112. Se observa una fuerte dependencia del tamaño y ancho de los granos en la zona columnar y equiaxial respecto de la velocidad de enfriamiento. Se miden los espaciamientos dendríticos secundarios y se correlacionan las medidas de estos con los valores de la velocidad de enfriamiento y la posición desde la base de la probetas.

Análisis de propiedades estructurales, magnéticas e hiperfinas de sistemas espinela Fe-Al-O por cálculos abinitio

• Karen Lizeth Salcedo Rodríguez,[1,2] Jhon J Melo Quintero,[3,4] Claudia E. Rodríguez Torres,[2] Leonardo Errico[2,5]

[1] *Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata*
[2] *Instituto de Física La Plata, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP - CONICET*
[3] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata*
[4] *Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), CONICET - UNLP*
[5] *Universidad Nacional del Noroeste de la Pcia. de Buenos Aires (UNNOBA), Monteagudo 2772, Pergamino, CP 2700 Buenos Aires, Argentina*

Los óxidos con estructura de espinela son de gran interés en diferentes campos. En estos óxidos, las propiedades electrónicas y magnéticas son muy sensibles a los cambios estructurales o a la presencia de defectos como la inversión catiónica, factores de escala o vacancias de oxígeno. Estos defectos están relacionados con el origen de una amplia variedad de comportamientos y propiedades que presentan estos óxidos, lo que los convierte en excelentes candidatos para aplicaciones como dispositivos fotovoltaicos, baterías de iones de litio, fotocatálisis, aplicaciones médicas, etc. Los continuos estudios teóricos y experimentales de óxidos con estructura espinela han permitido en la última década grandes avances en la comprensión de la relación entre los cambios estructurales y electrónicos a nanoescala y los mecanismos subyacentes que activan las propiedades observadas.
Como en otros sistemas, las propiedades de los óxidos con estructura espinela están fuertemente relacionadas con las condiciones de síntesis. En el caso particular de las espinelas Al-Fe-O, las condiciones termodinámicas son un factor importante en la disposición atómica final. Dependiendo de la concentración de Fe/Al se pueden formar dos tipos de estructuras espinela: $FeAl_2O_4$ (aluminato de Fe) y Fe_2AlO_4 (ferrita de aluminio). El objetivo del presente trabajo es estudiar desde cálculos de primeros principios las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas y las interacciones hiperfinas de los átomos de Fe en ambos sistemas, según su cordinación tetraédrica u octaédrica. El objetivo principal de este trabajo es identificar las distribuciones de energía más bajas de cationes en los dos sitios catiónicos de las estructuras y la configuración de espín de cada sistema. La comparación entre los parámetros hiperfinos calculados en los sitios de Fe y el resultado experimental de ^{57}Fe Mössbauer se utilizará para confirmar nuestro modelo estructural y magnético para cada estructura. El estudio teórico se llevó a cabo utilizando el método FP-LAPW (Full-Potential Linearized Plane-Wave) basado en los primeros principios de la Teoría Funcional de Densidad (FP-LAPW) implementado en el código Wien2k, en el marco de la aproximación de gradiente generalizada (GGA)+U. Para obtener las estructuras de energía más bajas para cada sistema, se consideraron diferentes distribuciones de Fe y Al en los sitios catiónicos y diferentes configuraciones de espín. Los resultados obtenidos nos permiten analizar la inversión de grado en ambos compuestos Fe-Al-O, los momentos magnéticos y los cambios en los parámetros hiperfinos que van de la ferrita de aluminio al aluminato de hierro. Nuestros resultados también se comparan con diferentes resultados experimentales reportados en la literatura.

Modelado de mezclas de hidrocarburos: estructura y dinámica

• Carlos Gaston Ferrara,[1,2] Ariel German Meyra,[1] Verónica Duran,[2] Karen Palacio,[2] Lucia Turraca[2]

[1] *Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos, CONICET-UNLP*
[2] *Instituto de Ingeniería y Agronomía, Universidad Nacional Arturo Jauretche*

En los últimos años ha crecido de manera notable el interés en el estudio de diferentes fenómenos vinculados a las mezclas de hidrocarburos, sobre todo en el ámbito de las ciencias atmosféricas o de la industria del petróleo. En este trabajo presentamos el estudio de los cambios que se producen en la dinámica y estructura de mezclas de alcanos, metano/butano/decano en diferentes condiciones termodinámicas y de concentración. Se analizó y caracterizó el comportamiento dinámico y estructural de las mezclas a partir de diferentes variables, como son los perfiles de densidad, coeficiente de autodifusión, desplazamiento cuadrático medio, función de distribución radial o parámetros de orden. Todas las simulaciones se realizaron utilizando la técnica de dinámica molecular (MD), implementada con el paquete de GROMACS (GROningen MAchine for Chemical Simulations).

Modelado de la segregación superficial de la solución sólida Ni-Cr

• Laura Gelsi,[1] Mariela Fernanda del Grosso,[1,2] Hugo Osvaldo Mosca[1,3]

[1] *Grupo de Caracterización y Modelización de Materiales -Universidad Tecnologica Nacional-Facultad Regional General Pacheco*
[2] *Subg. de Aplicaciones de Aceleradores- CAC-CNEA-CONICET*
[3] *Dpto. Materia Condensada, CAC, CNEA*

Las aleaciones de Ni-Cr se han estudiado ampliamente y se han utilizado en un campo diverso de aplicaciones. Algunas de sus principales características son su excelente resistencia a la oxidación y corrosión a altas temperaturas, ya que el papel del Cr es facilitar la formación de películas de óxidos pasivos que inhiben el proceso de corrosión. Esto es de particular importancia en aplicaciones relacionadas con la energía, como los sistemas de energía nuclear, caracterizados por entornos hostiles donde la falta de resistencia a la corrosión puede ser perjudicial para la seguridad y confiabilidad. Se estudio por medio del método BFS la solución sólida de Ni-Cr para concentraciones de Ni entre 50 y 100 % at. Propiedades de la solución sólida, tales como la dependencia con la concentración y la temperatura del parámetro de red y el coeficiente de expansión fueron modelados, obteniéndose expresiones compactas para su determinación. Por otro lado, basados en los conceptos de energía de deformación y química del modelo BFS se pudo determinar la dependencia con la temperatura de la energía de superficie la cual conjuntamente con los resultados de las simulaciones, permitió la determinación de los perfiles de segregación. Esto permitió explicar el comportamiento experimental observado de la segregación de Ni y su dependencia con la concentración del mismo y la temperatura. La dependencia con la orientación de la superficie y la forma particular del perfil de concentración, indican que el comportamiento observado, identificando al Ni como especie segregante, puede ser fácilmente alterado por la presencia de impurezas.

Caracterización espectroscópica y magnética de paramagnetos en medio confinados

• Ana Laura Perez ,[1,2] Axel Kemmerer,[2] Luisina Forzani,[3] Sergio Dalosto,[1] Raul Urteaga,[1,4] Carlos Brondino[2]

[1] *Instituto de Física de Santa Fe - IFIS - CONICET*
[2] *Departamento de Física, Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe*
[3] *Centro de Investigación de Métodos Computacionales*
[4] *Facultad de Ingeniería Química - Universidad Nacional del Litoral*

El estudio de compuestos de coordinación que podrían funcionar como nanopartículas magnéticas es un campo relevante de investigación dentro del magnetismo molecular. En ello confluye tanto el interés por sus potenciales aplicaciones tecnológicas así como la comprensión a nivel básico de los fenómenos que las producen. Debido a que las propiedades magnéticas de un sistema extendido son muy diferentes a las propiedades magnéticas de sistemas aislados o clusters, el objetivo de nuestro trabajo se basa en estudiar complejos metálicos confinados, de forma de generar sistemas tipo clusters lineales, magnéticamente independientes uno de otros, y evaluar sus propiedades como entidades que generen nuevos materiales magnéticos. Se estudiaron las propiedades magnéticas mediante mediciones magnéticas (susceptibilidad magnética y magnetización) y de Resonancia Paramagnética Electrónica (EPR) de complejos de iones Cu(II) en distintos entornos de coordinación que en estado sólido y/o en solución presentan comportamientos estructurales y/o magnéticos 0-3D. Entender las propiedades magnéticas de estos sistemas de Cu(II) en estado sólido y solución sirve para su comparación con los estudiados en estado confinado. El confinamiento se realizó en matrices nano-porosas de alúmina formadas por poros regulares de diámetro ajustable. Se utilizó una técnica interferométrica que permite la caracterización optofluídica de estas estructuras a partir del estudio de la dinámica de llenado capilar utilizando fluidos simples. Luego se utilizó la misma técnica para monitorear el ingreso en los nanoporos de los complejos metálicos. La caracterización de la estructura electrónica de los centros metálicos, las interacciones magnéticas entre ellos, y orientación de los centros metálicos se llevó a cabo mediante EPR aplicada a las muestras obtenidas. Lo último se basa en la bien establecida correlación entre la matriz g del ion Cu(II) respecto del sistema de referencia molecular. Los ensayos realizados incorporando sulfato de Cu(II) pentahidratado y algunos complejos de Cu(II) con ligandos orgánicos en las membranas de alúmina porosa, mostraron que el confinamiento induce una orientación determinada de los complejos dentro de los poros. En el caso de los complejos con ligandos orgánicos también se observa cierto grado de ordenamiento, pero más difícil de estudiar debido a la menor intensidad de las señales de EPR. Actualmente se está estudiando la dependencia del ordenamiento de los complejos con el diámetro del poro. Para ello se utilizan metodologías similares a las de EPR de monocristales para determinar cómo el orden dentro de los poros está relacionado con la orientación del campo magnético externo y así poder predecir la orientación espacial del complejo orientado dentro del poro.

Síntesis y caracterización de compuestos $RE_2Ti_3Si_4$ con RE = Gd-Lu

• Manuel González Rodríguez Diez,[1] Bautista Bunge,[2] Diego Gaspar Franco[2,3]

[1] *Instituto de Tecnología J. Sábato, Comisión Nacional de Energía Atómica Argentina. Universidad Nacional de San Martín. Buenos Aires, Argentina*
[2] *Instituo Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo - Comisión Nacional de Energía Atómica*
[3] *Laboratorio de Bajas Temperaturas, Centro Atómico Bariloche - CONICET*

Las materiales que carecen de elementos de simetría impropios, denominados quirales, han despertado gran interés en los últimos años debido al descubrimiento de estados magnéticos novedosos tales como texturas magnéticas denominadas skyrmions.
En este trabajo exploramos la síntesis y caracterización de compuestos de fórmula general $RE_2Ti_3Si_4$, en donde RE es una tierra rara pesada (Gd a Lu), que cristalizan en el grupo espacial quiral $P4_12_12$, lo cual podría dar lugar a propiedades magnéticas novedosas.
Las muestras fueron sintetizadas fundiendo los elementos en un horno de arco y se llevaron a cabo estudios cristalográficos llevando a cabo análisis Rietveld de patrones de difracción de rayos X. El comportamiento magnético se exploró mediante mediciones de magnetización y resistencia eléctrica.

Frustración magnética en el compuesto quiral $EuIr_2P_2$

• Diego Gaspar Franco[1,2]

[1] *Instituo Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo - Comisión Nacional de Energía Atómica*
[2] *Laboratorio de Bajas Temperaturas, Centro Atómico Bariloche - CONICET*

Los sistemas intermetálicos basados en tierras raras presentan una gran variedad de fenómenos físicos, explicados en los modelos más sencillos según el balance entre las interacciones magnéticas de largo alcance y el efecto Kondo. Más recientemente el estudio del magnetismo en algunos de estos compuestos se ha enfocado en la presencia de frustración magnética y quiralidad, situaciones en las cuales es posible observar nuevos fenómenos físicos.
En este trabajo se estudia el material quiral $EuIr_2P_2$. Mediciones de calor específico y magnetización muestran una transición a un estado antiferromagnético a 5 K, seguido de una segunda transición a 3 K. Sin embargo las interacciones predominantes parecen ser de tipo ferromagnéticas, lo cual sugiere cierto grado de frustración. La altura del pico de calor específico magnético en la temperatura de orden parece sugerir que el sistema pasa de un estado paramagnético a uno de amplitud modulada a 5 K. En tal caso, la transición a 3 K podría ser el paso de la estructura magnética de amplitud modulada a una de momentos iguales.
Un análisis simple basado en un modelo de Heisenberg utilizando expansiones de alta temperatura indica que las propiedades observadas son compatibles con la presencia de varias interacciones magnéticas relevantes, de naturaleza ferro y antiferromagnética que resultan en frustración.

Propiedades estructurales y magnéticas de cadenas cuasi-unidimensionales de ftalocianinas de hierro

• Román Picó,[1,2] Ignacio Hamad,[1,2] Paula Abufager[1,2]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura - Universidad Nacional de Rosario*
[2] *Instituto de Física de Rosario, CONICET-UNR*

Las Ftalocianinas de Hierro (FePc) son moléculas organometálicas que, crecidas sobre una superficie, forman capas dentro de las cuales los átomos de Fe se ordenan en forma de cadenas cuasi-unidimensionales. Por ello, son de interés por su posible uso en el campo de la spintrónica molecular, en particular en el ámbito de la inyección y transporte de spin. Aquí, mediante cálculos estructura electrónica utilizando la teoría del funcional densidad (DFT), estudiamos estructuralmente cadenas de FePc, para luego calcular parámetros para construir un modelo magnético completo para las mismas. Así, obtenemos que se forman cadenas cuasi-unidimensionales que crecen con un ángulo de 26 respecto a la normal a la superficie, con una separación entre Fe de 3.24 A, teniendo cada molécula un spin S=1 concentrado en los mismos. Calculamos el acoplamiento de intercambio J entre Fe primeros vecinos, pero con anisotropía espacial. Además, encontramos una anisotropía magnética que da lugar a un término $DS_z^2 + E(S_x^2 - S_y^2)$ en el hamiltoniano modelo, producto de que en estas moléculas existe una fuerte interacción spin-órbita. En particular, obtuvimos que existe un valor distinto de 0 de la anisotropía transversal. Por último, analizamos la implicancia de este modelo en el magnetismo de la cadena de FePc, estudiando los posibles estados fundamentales y las excitaciones magnéticas.

Simulación computacional del efecto isotópico del Li sobre Ni y grafeno

• Marina Bellora,[1,2] Federico Cabello,[1,2] María Andrea Barral,[1,2] Federico Viva,[1,2] Horacio Corti,[1,2] Veronica Laura Vildosola[1,2]

[1] *Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (CNEA-CONICET)*
[2] *Departamento de Física de la Materia Condensada, CAC, CNEA-CONICET*

El litio se ha convertido en un material estratégico por su gran cantidad de usos y aplicaciones. La separación isotópica del Li se presenta como una gran oportunidad a nivel mundial y nacional en la tecnología nuclear, por su creciente demanda y el valor agregado que poseen las sales de los isótopos ^{6}Li y ^{7}Li puras o enriquecidas más de un 90 %. Esto ha incentivado la investigación en torno al desarrollo de nuevos métodos de separación isotópica más eficientes que los basados en la utilización de mercurio, y que a la vez sean ambientalmente sustentables. El proceso de separación isotópica mediante métodos electroquímicos depende de las características de los materiales utilizados, además de las variables de trabajo como la temperatura, densidad de corriente, entre otras. Identificar mediante modelado fisicoquímico cuáles son los factores más relevantes o limitantes para lograr una separación más eficiente es de incalculable valor a la hora de elegir los materiales a investigar experimentalmente. En este trabajo presentamos cálculos basados en la Teoría de la Funcional de la Densidad (DFT) para la adsorción de Li sobre las distintas superficies de níquel de bajo índice y sobre grafeno, con el fin de estudiar el efecto isotópico sobre estos sustratos en particular. Comenzamos con el cálculo de las energías superficiales de las orientaciones (001), (111) y (110) del níquel y distintos tamaños de celda para el grafeno, continuamos calculando las energías de adsorción del ^{7}Li, el isótopo más abundante, en los distintos sitios cristalinos de cada orientación y el corrimiento en las frecuencias de vibración de los isótopos adsorbidos. Estas frecuencias vibracionales se utilizan para calcular las funciones de partición reducidas con las cuales se obtiene el factor de fraccionamiento isotópico (R) en el equilibrio para cada situación simulada, el cual puede ser comparado con los resultados experimentales obtenidos por el grupo y reportados en la bibliografía. Cálculos preliminares de Li sobre Ni muestran corrimientos isotópicos resolubles por la simulación propuesta y valores de R en razonable acuerdo con los datos experimentales disponibles. El análisis parece indicar que el fraccionamiento será mayor para aquellos sustratos sobre los cuales el Li se ligue más débilmente.

Efecto del hierro (Fe) en la arcilla tipo 2:1, Na-MMT

• V. L. Diaz De Rosa,[1] A. V. Gil Rebaza,[1,2] M. L. Montes,[1,2] M. A. Taylor,[1,3] R. E. Alonso[1,3,4]

[1] *Instituto de Física La Plata – IFLP, CONICET-CCT La Plata, (1900) La Plata, Argentina*
[2] *Dto de Física, Fac. de Cs. Exactas, UNLP*
[3] *Facultad de Ingeniería - Universidad Nacional de La Plata*
[4] *Instituto de Ingeniería y Agronomía, Universidad Nacional Arturo Jauretche*

La contaminación ambiental constituye uno de los más grandes problemas de la sociedad actual. En particular la contaminación del agua se ha convertido en uno de los aspectos de mayor trascendencia por su incidencia directa sobre la calidad de vida. Dentro de las tecnologías de remediación se encuentran las basadas en el proceso de sorción de los contaminantes. Entre los materiales adsorbentes, la montmorillonita (MMT) es ampliamente utilizada debido a su abundancia, área superficial específica y capacidad de intercambio catiónico relativamente altas (1). En la actualidad se busca, además de las buenas propiedades de adsorción, impartir respuesta magnética a los adsorbentes para permitir su manipulación, mediante campos magnéticos externos, reduciendo así los riesgos potenciales para la salud asociados con los métodos de manipulación directa (2).
El presente trabajo resume los resultados preliminares de un estudio que combina un enfoque teórico-experimental de la influencia del Fe sustitucional en Na-MMT, $Na_{0.41}[(MgAl_3O_8(OH)_4(Si_8O_{12})]_2, n(H_2O)$. Los resultados permitirán avanzar en un posterior estudio de las arcillas modificadas con óxidos de Fe magnéticos.
El modelado las arcillas conteniendo Fe en su estructura interna se realizó dentro del marco de la Teoría de la Funcional Densidad (DFT). Los cálculos de primeros principios se realizaron usando el método de pseudopotenciales y ondas planas (Código Quantum Espresso (3)). El término de correlación-intercambio ha sido descrita con GGA-PBE (4). Se ha determinado el gradiente de campo eléctrico en diferentes átomos utilizando el método GIPAW (5), los cuales serán contrastados con datos experimentales, NMR u otras técnicas nucleares. En particular para el caso de Fe se comparará con medidas obtenidos por espectroscopia Mössbauer.
Con la finalidad de obtener distintas disoluciones de Fe en Na-MMT, se ha considerado la fase prístina y las superceldas de 2x1x1 y 2x2x1 de Na-MMT, en donde un átomo de Mg se ha reemplazado por uno de Fe.

Referencias:

[1] Uddin MK. *A review on the adsorption of heavy metals by clay minerals, with special focus on the past decade*. Chem. Eng. J. **308**, 438 (2017). DOI
[2] Montes ML, Barraqué F, Bursztyn Fuentes AL, Taylor MA, Mercader RC, Miehé-Brendlé J, Torres Sánchez R M. *et al.*, *Effect of synthetic beidellite structural characteristics on the properties of beidellite/Fe oxides magnetic composites as Sr and Cs adsorbent materials*. Mater. Chem. Phys. **245**, 122760 (2020). DOI
[3] Giannozzi P, Baseggio O, Bonfá P, *et al.*, *Quantum ESPRESSO toward the exascale*, J. Chem. Phys. **152**, 154105 (2020). DOI
[4] Perdew JP, Burke K, and Ernzerhof M. *Generalized Gradient Approximation Made Simple*. Phys. Rev. Lett. **77**, 1396 (1996). DOI
[5] Yates J R, Pickard C J, and Mauri F. *Calculation of NMR chemical shifts for extended systems using ultrasoft pseudopotentials*. Phys. Rev. B **76**, 024401 (2007). DOI

Catalizadores de Pd/CeO_2 y $Ce_{1-x}Pd_xO_{2-\delta}$ para la reacción reversa de gas de agua. Estudio de la incorporación del paladio en la matriz de ceria

• Yesica M. Torres,[1] Ignacio O. Costilla,[1] Jesús E. Vega Castillo,[1] Fernando Prado,[1] Miguel D. Sánchez[1]

[1] *Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. L. N. Alem 1253, B8000CPB - Bahía Blanca, Argentina.*

Uno de los principales objetivos de la investigación actual sobre sistemas de óxidos metálicos para aplicaciones catalíticas es la optimización de la interacción entre el metal y el soporte, debido a sus implicaciones en la actividad catalítica para diferentes reacciones [1-2]. En el caso de materiales del tipo metal-ceria, la fuerte interacción entre los dos componentes en la interfaz puede conducir a propiedades catalíticas muy interesantes [3]. Investigaciones recientes han resaltado diferentes aspectos de la interacción metal-ceria, con una cantidad significativa de trabajos dedicados a los sistemas paladio-ceria para los que a menudo se observa una mayor actividad y/o estabilidad cuando el Pd se encuentra solubilizado en la estructura de la ceria [4].

Estudios preliminares realizados en nuestro grupo indican que catalizadores de Pd ($< 0.1 wt\%$) soportados en Al_2O_3 y modificados con CeO_x ($0.9 - 5.4 wt\%$), han sido activos y selectivos en la reacción reversa de gas de agua (RWGS), independientemente del contenido de ceria [5]. Estos catalizadores mostraron una conversión de CO_2 constante ($\sim 30\%$) para tiempos de reacción de hasta 35 horas a pesar de evidenciar una notable caída en la dispersión del Pd ($\sim 20\%$). Estudios realizados sobre sistemas atómicamente dispersos han dado evidencia que, para este tipo de reacción, el sitio activo no es la partícula metálica si no, los átomos metálicos ligados al soporte a través del O y rodeado por otras especies de oxígeno como grupos OH^- [6,7]. Así mismo, para estos procesos donde predominan las reacciones redox, se ha encontrado que en sistemas donde el Pd se encuentra disperso en la matriz del soporte, éste puede moverse reversiblemente hacia dentro y fuera de la estructura durante el proceso. De esta manera, se evita el sinterizado de partículas metálicas explicando la alta estabilidad catalítica [8].

Con el fin de investigar los procesos que tienen lugar durante la reacción de RWGS, en este trabajo se presentan los resultados de caracterización y reacción para dos catalizadores del tipo Pd-Ceria. Uno preparado mediante impregnación húmeda incipiente del precursor metálico sobre un soporte de ceria previamente sintetizado (Pd/CeO_x) y otro de ceria dopada con Pd, obtenido mediante el método de los citratos ($Ce_{1-x}Pd_xO_{2-\delta}$). Ambos catalizadores calcinados a $500°C$ en aire, fueron caracterizados previo y posteriormente a la reacción mediante DRX y XPS. Los resultados para el catalizador $Ce_{1-x}Pd_xO_{2-\delta}$ indican que la calcinación a $500°C$ fue suficiente para lograr la incorporación del metal a la estructura de la ceria y que durante el proceso de reacción el Pd migra a la superficie quedando altamente disperso. En el caso del catalizador Pd/CeO_x, se observó que luego de la calcinación el Pd se incorpora parcialmente a la estructura de la ceria y que el proceso continúa durante la reacción, tal como lo evidencian los resultados de XPS. En ambos casos las conversiones obtenidas fueron comparables a las encontradas en ensayos previos para catalizadores de $Pd - CeO_x/Al_2O_3$.

Referencias:

[1] W Gao *et al.*, Acc. Chem. Res. **50**, 787 (2017).
[2] Y Suchorski *et al.*, Nat. Mater. **17**, 519 (2018).
[3] KJ Zhu *et al.*, Surf. Sci. **669**, 79 (2018).
[4] KR Priolkar *et al.*, Chem. Mater. **14**, 2120 (2002).
[5] IO Costilla *et al.*, *Trabajo en preparación*.
[6] M Flytzani-Stephanopoulos, Acc. Chem. Res. **47**, 783 (2014).
[7] M Flytzani-Stephanopoulos and BC Gates, Annu. Rev. Chem. Biomol. Eng. **3**, 545 (2012).

[8] Y Nishihata *et al.*, Nature **418**, 164 (2002).

Catalizadores anódicos basados en $La_xSr_{1-x}TiO_{3-\delta}$ para celdas SOFC: síntesis y caracterización

• Yesica M. Torres,[1] Jesús E. Vega Castillo,[1] María G. Zimicz,[1] Fernando Prado,[1] Miguel D. Sánchez[1]

[1] *Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. L. N. Alem 1253, B8000CPB - Bahía Blanca, Argentina.*

Las propiedades catalíticas del ánodo en las celdas SOFCs son de gran importancia en el rendimiento global de la celda, debido a que estas pilas de combustible pueden trabajar directamente con hidrocarburos o alcoholes [1] ya que, la temperatura de trabajo es óptima para que ocurra la reacción de reformado de dichos combustibles, además de permitir valores adecuados de conductividad iónica en el material de electrolito. En este sentido, las estructuras tipo perovskita (ABO_3) presentan una serie de ventajas con respecto a otros catalizadores anódicos soportados, debido a la posibilidad de modificar las propiedades químicas, catalíticas y eléctricas a partir de la sustitución química en los sitios A y B [2-3]. Nuestro estudio consiste en la preparación del catalizador anódico tipo perovskita de $La_xSr_{1-x}TiO_{3-\delta}$ y su caracterización estructural y superficial. A través de la síntesis por el método PECHINI modificado [4], se evaluó el límite de solubilidad de La en la red cúbica de $SrTiO_3$ en el rango $0 \leq x \leq 0.7$. La evolución de la estructura cristalina en función del contenido de La fue determinada mediante el análisis de datos de difracción de rayos X (DRX) utilizando el método de Rietveld. La estructura cristalina del tipo perovskita de simetría cúbica hasta un valor de $x = 0.6$ se obtuvo a $600°C$, valor marcadamente inferior al reportado para estos materiales [5]. En los análisis de superficie, se utilizó la técnica XPS para determinar los estados de oxidación de los elementos presentes en la estructura y su contenido atómico superficial. Asimismo, se realizaron análisis de área BET que demuestran que estos materiales son potenciales candidatos para ser aplicados en catálisis y como ánodos de celdas SOFC. Actualmente se realizan ensayos para evaluar la incorporación de Pd en el sitio B de la estructura perovskita, con el fin de mejorar sus propiedades catalíticas debido a los beneficios que aporta este metal, tales como alta estabilidad y selectividad para el reformado seco de metano [6].

Referencias:

[1] N Mahato *et al.*, Prog. Mater. Sci. **72**, 141 (2015).
[2] WZ Zhu and SC Deevi, Mater. Sci. Eng. A **362**, 228 (2003).
[3] C Sun and U Stimming, J. Power Sources **171**, 247 (2007).
[4] WY Hernández *et al.*, Catal. Today **258**, 525 (2015).
[5] BK Park *et al.*, Int. J. Hydrog. Energy **37**, 4319 (2012).
[6] I Costilla *et al.*, Appl. Catal. A: Gen. **478**, 38 (2014).

Influencia del tamaño de grano en la difusión de hidrógeno en bcc Fe

• Viviana P Ramunni,[1,2] Maria Inés Pascuet,[1,2] Nicolas Castin,[3] Alejandro Mariano Fidel Rivas[1,4]

[1] *CONICET*
[2] *Departamento Materiales, CAC - CNEA*
[3] *SCK CEN - Belgian Nuclear Research Centre*
[4] *Departamento de Fisica, Tandar CNEA*

Hemos realizado cálculos numéricos para estudiar la difusión de hidrógeno (H) en bcc Fe, que contiene un borde de grano de simétrico(GB), en función de la temperatura y del tamaño de grano promedio. Para ello, hemos desarrollado un modelo microscópico eficaz que incluye la difusión tanto en el volumen como en el GB, incorporando así el tamaño de grano. Nuestro modelo distingue entre difusión a lo largo del GB, en paralelo con el volumen, mientras que la difusión a través del GB debe considerarse en serie. Las energías de unión y migración de los sitios intersticiales H necesarios en el modelo se obtienen a través de un estudio extenso de H disuelto en el GB simétrico [1]. Esto se realiza en el marco de un conjunto de potenciales interatómicos clásicos [2], y parcialmente a partir de cálculos empleando la Teoría Funcional de la Densidad (DFT) [3], con el fin de verificar la consistencia de las estructuras. Encontramos que los sitios preferenciales para H en el límite del grano retrasa la migración de H mejorando su solubilidad. Nuestros resultados para los coeficientes de difusión de H están de acuerdo con los datos experimentales disponibles, sin embargo, varios tipos de GB están presentes en muestras reales. Además, vemos que para altas temperaturas, la difusión del H no depende del tamaño de grano, obteniendo resultados similares a los del volumen. Mientras que para temperaturas ambiente (290 K) y granos de tamaño nanométrico (100 nm), la difusión puede ser más lenta hasta dos órdenes de magnitud.

Palabras Clave: Trampas de hidrógeno, Difusión de hidrógeno, Bordes de grano de Fe, Influencia del tamaó de grano, Mdelado computacional.

Referencias:

[1] V.P. Ramunni *et al.*, Phys. Rev. B **74**, 054113 (2006).
[2] D. Jiang, E.A. Carter. Phys. Rev. B **70**, 064102 (2004).
[3] J.M. Soler, E. Artacho, J.D. Gale, A. García, J. Junquera, P. Ordejón, D. Sánchez-Portal. *The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation*. J. Phys. Condens. Matter **14**, 2745 (2002).

Doble frustración y excitaciones magneto-electro-elásticas en materiales multiferroicos colineales

• Daniel C. Cabra,[1] Ariel O. Dobry,[2] Claudio J. Gazza,[2] Gerardo L. Rossini[3]

[1] *Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos, CONICET-UNLP*
[2] *Instituto de Física de Rosario, CONICET-UNR*
[3] *Instituto de Física de La Plata, CONICET*

Presentamos un modelo microscópico para sistemas multiferroicos tipo II (con espines colineales). Los órdenes dipolar eléctrico y magnético, inducidos por campos externos, compiten en cuanto a la determinación de las distorsiones elásticas energéticamente favorables para la posición de los iones. Para ciertos rangos de la frustración magnética y de la anisotropía en el acoplamiento de espines, aparecen mesetas (plateaus) en la curva de magnetización M. Aumentando el campo magnético para superar esta meseta, se observan excitaciones fraccionalizadas de espín. Sobre la meseta $M = 0$ la excitación de espín produce un cambio masivo en la polarización eléctrica. La meseta $M = 1/3$ puede formar un estado magnético conocido como plateau cuántico; en este caso una excitación de espín induce excitaciones dipolares (tipo paredes de dominio) y deformaciones elásticas localizadas. Este efecto magneto-eléctrico peculiar se puede interpretar en términos de cuasipartículas magneto-electro-elásticas. Nuestros resultados son obtenidos mediante cálculos extensivos de DMRG en el sector de spines y ecuaciones autoconsistentes para las distorsiones de la red.

Diseño, modelización y construcción de un sistema de automatización para el control de la dirección del campo magnético en experimentos criogénicos

• Marco Crivaro Nicolini,[1] Ingrid Heuer,[1] Gabriela Pasquini[1,2]

[1] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*
[2] *Instituto de Fisica de Buenos Aires y Departamento de Fisica, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires*

En el Laboratorio de Bajas Temperaturas de la FCEyN se realizan diversos experimentos a temperaturas criogénicas en los que es necesario variar la dirección del campo magnético. En particular, actualmente se están investigando fases con orden nemático en superconductores no convencionales, mediante experimentos de transporte bajo deformación controlada [1]. Para variar la dirección del campo se ubica la muestra y el dispositivo de medición en un criostato, centrado a su vez entre los polos de un electroimán ubicado en una plataforma giratoria. Hasta el momento el giro era manual, lo que imposibilitaba la automatización de las mediciones en función de la dirección del campo.
En este trabajo se diseñó un sistema para automatizar y controlar dichas mediciones. El trabajo abarca por un lado el diseño y la construcción de una base motorizada acoplada a la base del electroimán, con los cálculos de precisión y tolerancias mecánicas involucradas. Por otro lado, la implementación de código para el control del dispositivo por medio de un Arduino y su comunicación con una interfaz gráfica. Se presenta el diseño final, su calibración y puesta a punto y prueba de performance del sistema en mediciones preliminares.

Referencias:
[1] J. Schmidt, V. Bekeris, G. S. Lozano, M. V. Bortulé, M. Marziali Bermúdez, C. W. Hicks, P. C. Canfield, E. Fradkin, and G. Pasquini, Phys. Rev. B **99**, 064515 (2019).

Excitaciones magnéticas en el antiferromagneto triangular dopado

• Ignacio Pomponio,[1] Luis Manuel,[1] Adolfo Trumper[1]

[1] *Instituto de Física de Rosario, CONICET-UNR*

En este trabajo se estudian los efectos combinados de la frustración magnética y la itinerancia electrónica sobre las propiedades magnéticas de un antiferromagneto. Uno de los modelos más naturales que describe grados de libertad de carga y espín es el modelo t - J que, aunque permite el salto de electrones hacia sitios vecinos desocupados, prohíbe la doble ocupación electrónica de un orbital y minimiza la energía de interacción entre dos espines vecinos cuando estos apuntan en sentidos opuestos.
El procedimiento para tratar con este sistema de muchas partículas interactuantes consiste en descomponer los grados de libertad de espín y carga en bosones de Schwinger y fermiones esclavos, y una vez expresado el hamiltoniano en estas nuevas variables construir la función de partición mediante la formulación de integral de caminos. Esta integral no puede ser resuelta analíticamente, pero puede desacoplar interacciones mediante una transformación de Hubbard-Stratonovich, para luego poder realizar una aproximación de punto de ensilladura. Introduciendo un campo magnético que seleccione el orden magnético del sistema, se rompe explícitamente la simetría en una red finita, algo que ocurre espontáneamente en el límite termodinámico. Esto permite calcular correctamente el factor de estructura dinámico, que revela el espectro de excitaciones de espín presentes en el sistema.
El interés en obtener teóricamente los espectros de excitaciones magnéticas radica en que pueden ser observados mediante experimentos de dispersión inelástica de neutrones. Con esa motivación, se computaron el factor de estructura dinámico en función del dopaje y las distintas escalas de energía presentes en las fases antiferromagnéticas del modelo t - J sobre la red triangular a temperatura cero.

Simulación de perceptrones simples a partir de memristores de manganita

• W. Quiñonez,[1,2,3] W. Román Acevedo,[2,3] M. J. Sánchez,[3,4,5] D. Rubi[2,3]

[1] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*
[2] *Centro Atómico Constituyentes, Comisión Nacional de Energía Atómica*
[3] *Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (CNEA-CONICET)*
[4] *Instituto Balseiro - Universidad Nacional de Cuyo*
[5] *Centro Atómico Bariloche - CONICET, Comisión Nacional de Energía Atómica*

El cómputo neuromórfico pretende emular las arquitecturas y mecanismos de procesamiento de la información del cerebro. Para ello, se necesitan nuevos dispositivos micro o nano-electrónicos (hardware) que repliquen el comportamiento eléctrico de sinapsis y neuronas. Los memristores -estructuras metal/óxido aislante/metal capaces de cambiar su resistencia eléctrica entre distintos estados no volátiles- son capaces de reproducir eléctricamente el peso sináptico adaptable -analógico- de las sinapsis cerebrales. En este trabajo analizamos mediante simulaciones numéricas la implementación de memristores basados en films delgados de manganita -microestructurados mediante litografía y caracterizados por curvas de potenciación y depreciación sináptica medidas experimentalmente- en perceptrones simples para el reconocimiento de caracteres. La simulación de los perceptrones permitió estudiar la dependencia del proceso de convergencia de la red neuronal con distintas características de las curvas de potenciación y depreciación sináptica, como el ancho de la ventana de conductividades posibles, su linealidad y su simetría. Se espera que los resultados obtenidos contribuyan a la implementación de redes neuronales por hardware a partir de arreglos de memristores con geometría de barras cruzadas.

Expansión Adiabática a Segundo Orden en Transporte Cuántico

• Sebastian E. Deghi,[1,2] Raul A. Bustos Marun[1,2,3]

[1] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*
[2] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*
[3] *Departamento de Matematica y Fisica, Facultad de Ciencias Quimicas, UNC*

Los dispositivos nanoelectromecánicos en general y nanomotores en particular, son áreas de estudio que han atraído gran atención en los últimos años [3, 8, 9]. El principio de funcionamiento de la mayoría de las propuestas experimentales y teóricas pueden explicarse clásicamente. No obstante, en la nanoescala, muchos fenómenos observados son de características estrictamente mecánico cuánticas, siendo el transporte cuántico dependiente del tiempo la herramienta fundamental para su estudio y compresión.

Los marcos teóricos con mayor divulgación utilizados para el estudio del transporte cuántico involucra funciones de Green, siendo los formalismos de Schwinger-Keldysh y Kadanoff-Baym los mas utilizados [5]. Resolver problemas de transporte cuántico con Hamiltonianos dependientes del tiempo puede resultar todo un desafío, especialmente si hay una gran separación en las escalas temporales de los grados de libertad involucrados. En estos casos resulta muy útil trabajar con expansiones adiabáticas, donde los términos de orden cero corresponderán a soluciones con Hamiltonianos congelados en el tiempo (aproximación de Born-Oppenheimer). En la bibliografía especializada se pueden encontrar distintos trabajos basados en diferentes enfoques teóricos que proporcionan correcciones de orden uno (proporcionales a una velocidad) a la aproximación adiabática [1, 2, 4]. Debido a su dificultad teórica, resulta difícil encontrar trabajos con correcciones de segundo orden a la aproximación adiabática de las funciones de Green [6, 7]. Más aún, de los pocos trabajos que se pueden encontrar las formulas presentadas resultan útiles solo para casos particulares.

En este trabajo se calculó la segunda corrección al término adiabático de las funciones de green propias del formalismo de Schwinger-Keldysh: funciones de Green avanzadas, retardadas, mayores y menores. Además, se calcularon las correcciones a segundo orden de los observables más importantes en el contexto del transporte cuántico aplicado a dispositivos nanoelectromecánicos: corrientes de partículas, corrientes de calor, fuerzas inducidas por corrientes y la autocorrelación de las fuerzas inducidas por corrientes. Los resultados de nuestro trabajo tienen aplicaciones en una gran variedad de sistemas nanoelectromecánicos y en particular, permitirían estudiar mejor la ruptura de adiabaticidad y sistemas muy alejados de una estricta aproximación de Born-Oppenheimer.

Referencias:

[1] Niels Bode, Silvia Viola Kusminskiy, Reinhold Egger, and Felix von Oppen. *Scattering theory of current-induced forces in mesoscopic systems*. Phys. Rev. Lett. **107**, 036804 (2011).

[2] H. L. Calvo, F. D. Ribetto, and R. A. Bustos-Marún. *Real-time diagrammatic approach to current induced forces: Application to quantum-dot based nanomotors*. Phys. Rev. B, **96**, 165309 (2017).

[3] Alexander Croy and Alexander Eisfeld. *Dynamics of a nanoscale rotor driven by single-electron tunneling*. EPL (Europhysics Letters) **98**, 68004 (2012).

[4] Sebastián E Deghi, Lucas J Fernández-Alcázar, Horacio M Pastawski, and Raúl A Bustos- Marún. *Current-induced forces in single-resonance systems*. J. Phys.: Condensed Matter, **33**, 175303 (2021).

[5] Hartmut Haug, Antti-Pekka Jauho, *et al.*, *Quantum kinetics in transport and optics of semiconductors*, Volume 2. Springer (2008).

[6] Vincent F Kershaw and Daniel S Kosov. *Nonequilibrium green's function theory for nonadiabatic effects in quantum electron transport*. J. Chem. Phys. **147**, 224109 (2017).

[7] Vincent F Kershaw and Daniel S Kosov. *Non-equilibrium green's function theory for non-adiabatic effects in quantum transport: Inclusion of electron-electron interactions*. J. Chem. Phys. **150**,

074101 (2019).
[8] Josef Michl and E Charles H Sykes. *Molecular rotors and motors: recent advances and future challenges.* ACS nano **3**, 1042 (2009).
[9] Boyang Wang, Lela Vuković, and Petr Král. *Nanoscale rotary motors driven by electron tunneling.* Phys. Rev. Lett. **101**, 186808 (2008).

El efecto de la nitruración en el sensado de humedad de film de carbono amorfo hidrogenado

• Giuliano Frattini ,[1,2] Sindry Torres,[1,2] Leonel Silva,[3] Carlos Repetto,[1,2] Bernardo Gómez,[1,2] Ariel Oscar Dobry[1,2]

[1] *Instituto de Física Rosario, UNR-CONICET*
[2] *Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura - Universidad Nacional de Rosario*
[3] *INTEMA, Facultad de Ingeniería, CONICET - Universidad Nacional de Mar del Plata*

Estudiamos el efecto de nitrurar films de carbono amorfo hidrogenado (a-C:H). Apuntamos a las propiedades para sensar la humedad ambiente (RH) que tienen estos films. Los mismos fueron preparados en dos etapas, combinando la técnica de deposición física en fase gaseosa (PAPVD) con la nitruración por plasma. Deconvolucionando el espectro Raman identificamos dos picos correspondientes a los modos D y G, característicos del a-C:H. Después del tratamiento con un plasma de N2-H2 , los picos se angostan y se corren a la derecha, lo que asociamos a la incorporación de N en la estructura. Observamos que la sensibilidad a RH, medida por el cambio en la resistividad de baja frecuencia, mejora con la nitruración.
Mediante espectroscopía de impedancias estudiamos la dependencia con la frecuencia de la conductividad en AC ($\sigma(\omega)$). Antes de nitrurar el comportamiento pareciera ser universal y de la forma $\sigma(\omega) \sim A\omega^s$, análogo a lo observado en otros sistemas amorfos. El efecto de la humedad es cambiar la escala global A. Al nitrurar, s aumenta y se vuelve dependiente de la humedad. Asociamos este comportamiento con el cambio en el mecanismo de interacción entre el sustrato y las moléculas de agua cuando la muestra es nitrurada.

Fases exóticas en sistemas magnéticos inducidas por interacciones RKKY y campo magnético externo

• Atilio Vela Wac,[1,2] Flavia A. Gómez Albarracín,[1,2] Daniel C. Cabra[2,3]

[1] *Facultad de Ingeniería - Universidad Nacional de La Plata*
[2] *Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos, CONICET-UNLP*
[3] *Facultad de Ciencias Exactas - Universidad Nacional de La Plata*

En este trabajo se consideró un modelo de espines tipo Ising en la red cuadrada con una competencia entre la interacción de intercambio directa a primeros vecinos y acoplamientos efectivos tipo RKKY, cuyo origen es la interacción con electrones itinerantes. La interacción tipo RKKY es, en principio, de largo alcance, y depende del momento de Fermi de los electrones itinerantes y de la constante de acoplamiento de la interacción RKKY. Este modelo, dependiendo de los parámetros elegidos, puede presentar frustración magnética.
Se analizaron numéricamente las fases de baja temperatura, utilizando el algoritmo de Monte Carlo Metrópolis. Se puso el foco en zonas donde el efecto de las interacciones RKKY es más fuerte, variando los parámetros alrededor de los valores para los que la constante de intercambio efectiva a primeros vecinos (resultado de la suma de la constante de acoplamiento directo y de la RKKY) se anula. Se halló que el fruto de la combinación de frustración y campo magnético externo es una plétora de plateaux de magnetización exóticos. Este es un primer paso en la exploración de los efectos de la interacción RKKY en sistemas más complejos.

Estudio teórico-computacional de las perovskitas $CsGeX_3$ (X=I, Br, Cl) y sus aplicaciones en celdas solares

• Harry B. Saltos Sánchez,[1,2] Arles V. Gil Rebaza,[3] Marcelo A. Cappelletti[2,4]

[1] *Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires, Calle 526 entre 1 y 11, 19 La Plata, Argentina*
[2] *Grupo de Control Aplicado (GCA), Instituto LEICI (UNLP-CONICET), Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata, C.C.91 (1900), La Plata, Argentina*
[3] *Departamento de Física e Instituto de Física La Plata (IFLP, CCT La Plata, CONICET-UNLP), Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, CC 67, 900 La Plata, Argentina*
[4] *Programa TICAPPS, Universidad Nacional Arturo Jauretche, Av. Calchaquí 600 (1888), Florencio Varela, Argentina.*

Las celdas solares basadas en perovskitas totalmente inorgánicas son una nueva alternativa para el desarrollo más eficiente en la tecnología e industria de almacenamiento de energía solar. Dentro de estos materiales, están las perovskitas de haluro inorgánico $CsPbI_xBr_{3-x}$, donde el rango del band-gap varía desde 1.72 eV a 2.31 eV para los casos del $CsPbI_3$ y $CsPbBr_3$, respectivamente. El inconveniente en estos materiales radica en que contienen Pb, siendo este un material contaminante al medio ambiente llegado el momento de la manufacturación como del desecho de los dispositivos. Es por ello, que se han propuesto compuestos semejantes que no contengan Pb, tales como las perovskitas $CsGeI_3$, $CsGeBr_3$ y $CsGeCl_3$.
En el presente trabajo, usando métodos de primeros principios basados en la Teoría de la Funcional Densidad, estudiamos la estabilidad estructural, la estructura electrónica y el band-gap de las perovskitas $CsGeI_3$, $CsGeBr_3$ y $CsGeCl_3$, y analizamos las diferencias o similitudes de sus propiedades físicas respecto de $CsPbI_3$, $CsPbBr_3$. Todos los cálculos fueron realizados usando el método Full-Potential Augmented Plane Wave implementado en el código ELK. Los resultados obtenidos de los cálculos ab-initio nos permitirán realizar simulaciones numéricas sobre la eficiencia de las celdas solares basadas en estos compuestos, para lo cual se usará el software SCAPS-1D.

Fases de baja temperatura en el modelo de Ising en la red de panal de abejas frustrada: orden y degeneración extensiva

• Nahuel Zanini,[1] Flavia Alejandra Gomez Albarracin[1,2]

[1] *Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos, CONICET-UNLP*
[2] *Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata*

Presentamos un estudio de las fases de baja temperatura del modelo de Ising en la red de panal de abejas con interacciones antiferromagnéticas hasta terceros vecinos. A través de simulaciones de Monte Carlo, identificamos tres tipos de fases ordenadas donde se rompen diferentes simetrías en cada caso, y por lo tanto presentan diferente grado de degeneración. Construimos los parámetros de orden correspondientes y analizamos diferentes variables termodinámicas. Luego, nos enfocamos en el estudio de las líneas degeneradas del diagrama de fase, y especialmente en el punto altamente frustrado, donde las tres fases tienen la misma energía. Analizando la entropía en función de la temperatura, observamos dos regiones con entropía por espin finita a bajas temperaturas (degeneración extensiva): una de las líneas degeneradas y el punto altamente frustrado. Estudiamos finalmente los factores de estructura de las diferentes regiones, y obtenemos resultados consistentes con los análisis previos, destacándose el comportamiento tipo líquido de espín en el punto altamente frustrado.

Diseño y construcción de un sistema de control termoeléctrico para experimentos de magneto óptica

• Estefania Agostina Ruiz Bochides,[1] Gabriela Pasquini[1,2]

[1] *Departamento de Fisica, FCEyN, UBA*
[2] *Instituto de Física de Buenos Aires, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales CONICET- Universidad de Buenos Aires*

Mediante una colaboración entre el Laboratorio de Óptica y Fotónica (LOF) y el Laboratorio de Bajas Temperaturas (LBT) de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad de Buenos Aires (FCEyN - UBA), recientemente fue desarrollada y puesta a punto una técnica de magnetometría por imágenes con la que actualmente se está estudiando la dinámica de paredes de dominio magnéticas (PDM) en películas ultra-delgadas. En trabajos recientes el grupo estudió la dinámica de las PDM bajo la aplicación de campos alternos en el régimen conocido como *creep*, en el que las paredes se desplazan asistidas por el campo aplicado gracias a un mecanismo de activación térmica [1,2]. En este régimen las velocidades de desplazamiento de las paredes dependen fuertemente de la temperatura. Por lo tanto, para tener un buen control y repetitividad en los resultados, es deseable un control de esa variable.
El objetivo de este trabajo fue diseñar y construir un arreglo experimental con el fin de regular la temperatura de las muestras magnéticas en el entorno de temperatura ambiente utilizando dos *celdas termoeléctricas* como fuentes térmicas. Para ese fin se realizó un modelado del sistema térmico por elementos finitos. En el diseño se tuvo en cuenta el hecho de que el dispositivo de control térmico no debe interferir con los pulsos de campo magnético aplicados a las muestras, las restricciones impuestas por el diseño del microscopio y la necesidad de una baja disipación para evitar el uso de ventilación forzada. La temperatura se registra en distintos puntos del montaje. Presentamos el diseño del dispositivo, su caracterización (rango de temperatura alcanzado, tiempos de respuesta, gradientes térmicos) y pruebas preliminares de funcionamiento en el microscopio.

Referencias:

[1] P. Domenichini, C. P. Quinteros, M. Granada, S. Collin, J.-M. George, J. Curiale, S. Bustingorry, M. G. Capeluto, and G. Pasquini. Phys. Rev. B. **99**, 214401 (2019).
[2] P. Domenichini, F. Paris, M. G. Capeluto, M. Granada, J.-M. George, G. Pasquini, and A. B. Kolton. Phys. Rev. B. **103**, 220409 (2021).

Estudio de nanoprecipitados metaestables en una aleación termoendurecible Cu-2Be (%p.)

• Susana Montecinos,[1,2,3] Sebastian Tognana,[2,3,4] Walter Salgueiro[2,3,4]

[1] *CONICET*
[2] *CIFICEN (UNCPBA-CICPBA-CONICET), Pinto 399, 7000 Tandil, Argentina*
[3] *Instituto de Física de Materiales Tandil. Facultad de Ciencias Exactas. Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires. Pinto 399 - 7000 Tandil*
[4] *Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires, Calle 56 entre 10 y 11, 1900 La Plata, Argentina*

La aleación Cu-2Be (%p.) es de gran interés debido a sus excelentes propiedades mecánicas, anti-chispa, resistencia a la corrosión y alta dureza. Sus buenas propiedades de resistencia mecánica y dureza se obtienen mediante tratamientos de envejecimiento a temperaturas en el rango de 300-450°C, mediante los cuales se induce la formación de nanoprecipitados metaestables. Los nanoprecipitados γ'' y γ' son fases metaestables que juegan un importante rol en el endurecimiento del material y se inducen previo a la formación de precipitados de equilibrio γ. Al aumentar el tiempo de envejecimiento la fase γ'' crece gradualmente y los precipitados se vuelven más alargados, transformándose en fase γ', la cual produce la mayor dureza de material. En este trabajo se estudió la formación de nanoprecipitados γ'' y γ' formados en una aleación Cu-2Be (%p.) a partir de envejecimientos a distintas temperaturas: 350°C por 5 h y 400°C por 45 min. Los tiempos y temperaturas de envejecimiento fueron seleccionados a partir de curvas de dureza obtenidas previamente para muestras sometidas a envejecimientos a distintas temperaturas, de manera de obtener los mayores valores de dureza para cada temperatura. En ambas muestras se encontraron valores de dureza entre 350 y 400 HV. Mediante mediciones de módulo elástico y utilizando un modelo micromecánico se estimó la fracción de precipitados en cada caso. Las muestras se analizaron mediante SAXS (Small Angle X-Ray Scattering), encontrando claras señales de estructuras particuladas en ambas muestras envejecidas, a partir de las cuales se obtuvieron parámetros que dan una idea del tamaño de los precipitados. Por otro lado, se corroboró que una muestra homogeneizada sin envejecimiento posterior no presenta señales propias de sistemas particulados. Se encontró que la muestra envejecida a 350°C presenta nanoprecipitados más pequeños que aquella envejecida a 400°C, con una similar fracción en volumen. En base a este resultado se esperaría un mayor número de precipitados en la muestra envejecida a 350°C. Los resultados se discuten teniendo en cuenta la mayor o menor capacidad de los precipitados de endurecer la muestra en función de sus características.

Magnetismo y transporte de espín en bicapas epitaxiales $Co_{100-x}Fe_x$/Ta

• Adrián Alonso González Comunian,[1] Daniel Velázquez Rodriguez,[1] Javier Gómez,[1] Alejandro Butera,[1] Luis Avilés-Félix[1]

[1] *Centro Atómico Bariloche, CONICET - Instituto Balseiro, UNCuyo*

La manipulación de la carga y del espín de los electrones para el desarrollo de dispositivos espintrónicos ha despertado un creciente interés en los últimos años, a tal punto que hoy en día es necesaria la generación y detección de corrientes polarizadas en espín para su funcionamiento. Entre los sistemas más estudiados se encuentran los sistemas bicapas ferromagneto-metal no magnético (FM-NM), que al ser sometidos a un campo alterno de alta frecuencia (GHz) inyectan, en el metal no magnético, una corriente cuyos portadores de carga generan un desbalance de espín sin que haya transferencia neta de carga. Este fenómeno, que se conoce como corriente pura de espín, y la comprensión de sus propiedades es de interés tecnológico debido a que las corrientes de espín no disipan energía, ocasionando que se reduzca el calentamiento y las pérdidas de energía debidas al efecto Joule.
Recientemente se ha reportado que la aleación $Co_{25}Fe_{75}$ presenta un bajo *damping* o amortiguamiento magnético, parámetro que determina la velocidad y la energía requerida para la operación de dispositivos electrónicos modernos[1], debido a las características de la estructura de bandas en la aleación $Co_{100-x}Fe_x$. En esta charla se presentarán los resultados de la caracterización magnética y de transporte de espín en sistemas bicapas $Co_{100-x}Fe_x$(10 nm)/Ta (5 nm), x = 65, 70, 75, 80, 85, crecidos sobre sustratos monocristalinos de MgO (100). La caracterización por magnetometría Kerr y resonancia ferromagnética permitieron verificar que las películas de $Co_{100-x}Fe_x$ crecen epitaxialmente con una estructura cúbica rotada 45 con respecto a la dirección (100) del plano del sustrato de MgO, lo que determina los ejes de fácil y difícil magnetización[2]. Por otro lado, las mediciones de transporte de espín utilizando *spin pumping* y efecto Hall de espín inverso, permitieron detectar voltajes inducidos, asociados a la conversión de corriente de espín a corriente de carga, del orden de 40 μV ($Fe_{80}Co_{20}$) lo que demuestra una eficiente conversión de corriente de espín a corriente de carga en la capa de Ta.

Referencias:

[1] Schoen, M. A. W. *et al.*, *Ultra-low magnetic damping of a metallic ferromagnet*. Nat. Phys. **12**, 839 (2016).
[2] Velázquez Rodriguez, D. *et al.*, *Relaxation mechanisms in ultra-low damping Fe80Co20 thin films*. J. Magn. Magn. Mater. **504**, 166692 (2020).

Desarrollo e implementación del método del operador hermítico para bosones impenetrables

• Adan Garros,[1] Elías Ríos,[2] Diego R. Alcoba,[1,3] Pablo Capuzzi,[1,3] O. B. Oña,[2] A. Torre,[4] L. Lain[4]

[1] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, 1428 Buenos Aires, Argentina.*
[2] *Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas, Universidad Nacional de la Plata, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Diag. 113 y 64 (S/N), Sucursal 4, CC 16, 1900 La Plata, Argentina.*
[3] *Instituto de Física de Buenos Aires, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Ciudad Universitaria, 1428 Buenos Aires, Argentina.*
[4] *Departamento de Química Física, Facultad de Ciencia y Tecnología, Universidad del País Vasco. Apdo. 644, E-48080 Bilbao, España.*

El método del operador hermítico (HOM) permite construir estados excitados de sistemas correlados de muchas partículas y, a partir de los mismos, extraer un espectro de energías de excitación en términos de las matrices de densidad reducida (RDM) de un estado de referencia. Este método fue originalmente propuesto por Bouten, van Leuven, Mihailovich y Rosina [1] como una manera de superar las limitaciones de las técnicas basadas en referencias sin correlación, como la aproximación de fases al azar ampliamente utilizada en física nuclear. Posteriormente, se desarrollaron técnicas del método HOM para sistemas atómicos y moleculares, ya sea basadas en la utilización de la matriz RDM de 2-cuerpos [2]; o sobre una porción de ésta, conocida como matriz G-partícula-hueco [3]. En la actualidad, la mejora en la capacidad de cómputo permite determinar con gran exactitud las matrices RDMs de 2-, 3- y 4-cuerpos en sistemas electrónicos con fuerte correlación que pueden ser descriptos correctamente en el espacio de interacción de configuraciones doblemente ocupadas (DOCI) [4,5]. El éxito de estas metodologías ha puesto en evidencia la posibilidad de desarrollar y utilizar nuevas técnicas del método HOM para sistemas que siguen el álgebra de SU(2) y, por lo tanto, son susceptibles de describirse en el espacio DOCI. En este trabajo abordamos el desarrollo teórico y la implementación computacional del método para sistemas de bosones impenetrables, los cuales obedecen este álgebra. En particular, aplicamos el tratamiento resultante a la descripción de espectros electrónicos utilizando dos modelos de apareamiento de referencia exactamente resolubles: el Hamiltoniano reducido de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) y el de Richardson-Gaudin-Kitaev (RGK). Mostramos que la metodología proporciona excelentes resultados.

Referencias:

[1] M. Bouten, P. van Leuven, M. V. Mihailovich, and M. Rosina, Nucl. Phys. A **202**, 127 (1973).
[2] M. Rosina, Int. J. Quantum Chem. **13**, 737 (1978).
[3] C. Valdemoro, D. R. Alcoba, L. M. Tel, and E. Pérez-Romero, Int. J. Quantum Chem. **111**, 245 (2011).
[4] D. R. Alcoba, P. Capuzzi, A. Rubio-García, J. Dukelsky, G. E. Massaccesi, O. B. Oña, A. Torre, and L. Lain, J. Chem. Phys. **149**, 194105 (2018).
[5] G. E. Massaccesi, A. Rubio-García, P. Capuzzi, E. Ríos, O. B. Oña, J. Dukelsky, L. Lain, A. Torre, and D. R. Alcoba, J. Stat. Mech. Theory Exp. **2021**, 013110 (2021)

Estudio DFT sobre la estabilidad, las propiedades estructurales y electrónicas de nanoestructuras de TiO_2

• Sergio Schinca Vanini,[1] Gabriela F. Cabeza[1]

[1] *Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. L. N. Alem 1253, B8CPB - Bahía Blanca, Argentina.*

El dióxido de titanio (TiO_2) es de gran interés debido a su bajo costo, compatibilidad ambiental y estabilidad química. Ha sido utilizado en muchas áreas, pero su aplicación fotocatalítica sigue siendo un desafío por lo ancho de su band gap (3.2 eV) y la rápida recombinación de los pares electrón-hueco (e^- - h^+) que da como resultado una disminución en su actividad.
A escala nanométrica, las propiedades de los sistemas difieren de las del bulk y varios estudios sobre clústeres de partículas en el rango de los nanómetros han revelado algunas inusuales geometrías de enlace [1-3]. Esto invita a examinar el efecto del tamaño en las propiedades estructurales ya que las nanopartículas de TiO_2 podrían ser utilizadas como electrocatalizadores empleados en celdas de combustible debido a la posibilidad de generar H_2 a partir de la descomposición del agua mediante radiación electromagnética [4].
El propósito de este trabajo es investigar de forma teórica las propiedades de nanoclústeres de TiO_2 utilizando cálculos de primeros principios empleando el código VASP [5]. Se estudiaron las propiedades de nanopartículas de $(TiO_2)_N$ en función del número de formula unidad (f.u.) con N = 1 - 9. En particular, los sistemas para N = 5 - 9 se obtuvieron a partir de truncar la estructura anatasa bulk y se empleó dinámica molecular ab initio a 300 K para obtener la geometría más estable. Se evaluaron tendencias en propiedades tales como la longitud de enlace promedio, la energía de cohesión y la energía de enlace.
Encontramos que los sistemas tienden a la clusterización, incluso cuando el número de f.u. es mayor que en la celda unitaria de la estructura bulk y que la longitud de enlace promedio permanece casi constante a pesar de que aumenta el numero de f.u. de TiO_2. El estudio se completó analizando la densidad de estados, hallando en todos los casos una energía de band gap menor a la anatasa bulk.

Referencias:

[1] Sami Auvinen *et al*. J. Phys. Chem. C **115**, 17, 8484 (2011).
[2] Daeheum Cho *et al*. J. Chem. Theory Comput. **12**, 8, 3751 (2016).
[3] J Hua Xu *et al*. J. Mater. Chem. A, **2**, 12642 (2014).
[4] R Asahi *et al*. Phys. Rev. B **61**, 7459 (2000).
[5] G. Kresse; J. Hafner. Phys. Rev. B **47**, 558 (1993).

Análisis DFT de la adsorción de PET sobre ZnO y Co-ZnO

• M. Victoria Gallegos,[1] Cynthia A. Fuentes,[1] Walter Reimers,[2] C. Romina Luna,[2] Laura C. Damonte,[3] Jorge Marchetti,[4] Alfredo Juan[2]

[1] *CINDECA, CONICET, Fac.de Cs.Exactas, UNLP*
[2] *IFISUR, Universidad Nacional del Sur, CONICET, Departamento de Física, Av. Alem 1253, 8000 Bahía Blanca, Argentina*
[3] *Instituto de Física, Facultad de Cs. Exactas, Universidad Nacional de La Plata*
[4] *Department of Mathematical Science and Technology. Norwegian University of Life Sciences. Drøbakveien 31. 1432 Ås, Norway*

El Polietilentereftalato (PET) por su naturaleza semicristalina se hace apto para la fabricación de fibras, películas, botellas, entre otros [1]. Por lo general, el PET se recicla por procesos mecánicos, térmicos y químicos. Mediante este último, es posible recuperar la materia prima de PET o producir nuevo material de reciclaje a partir de ella [2]. Por otro lado, los óxidos de metales de transición presentan una amplia gama de aplicaciones en diversos campos tecnológicos, desde aplicaciones en catálisis hasta su uso en la industria electrónica. Como catalizadores en la glicólisis, permite obtener un gran rendimiento de monómeros y la posibilidad de su reutilización [3]. La presencia de metal en el catalizador es de suma importancia, ya que es el responsable de activar al grupo carbonilo del éster de la cadena de PET para que se lleve a cabo la despolimerización [4]. En un trabajo de Fuentes y col. se encontró que el rendimiento de la glicolisis mejora usando ZnO+Co con respecto a los óxidos puros [5].
Se hizo un estudio DFT de adsorción de la molécula PET sobre la superficie de ZnO(111) y ésta dopada con Cobalto. Se estudiaron los sistemas ZnO puro (wurtzita) y dopado con 3 % de cobalto (ZnO+Co). En los sistemas ZnO+Co se reemplazaron cuatro átomos de Zn por Co en la capa I (ZnO+Co(I)); en la capa II (ZnO+Co(II)) y en ambas capas (ZnO+Co(I-II)).
El PET aislado presenta un momento magnético (μ) de 2.0 μ_B, mientras que la superficie ZnO (111) pristina posee un momento magnético de 1.0 μ_B. La incorporación de Co como impureza sustitucional lleva a un incremento importante de μ respecto a la superficie pristina, independientemente de la localizaciones del Co dentro de ZnO. El valor obtenido es de aproximadamente 16.5 μ_B. La adsorción de PET sobre ZnO y ésta dopada con Co, lleva a una disminución del momento magnético. En el caso de PET+ZnO se observa la ausencia del comportamiento paramagnético (μ=0). Para la adsorción de PET en ZnO+Co(I) ZnO+Co(II) y ZnO+Co(I-II) el comportamiento paramagnético se mantiene, con una leve disminución del mismo en el primer y último caso; sin embargo en el caso de PET adsorbido sobre ZnO+Co(II) la disminución del momento magnético es significativa (1.6 μ_B).
Finalmente, respecto a la energía de adsorción de PET sobre ZnO pristina se obtuvo un valor de - 8.2 eV. Cuando hay presencia de cobalto en la superficie, la adsorción de PET mejora energéticamente en el siguiente orden ZnO+Co(I-II) $<$ ZnO+Co(I) $<$ ZnO+Co(II), con los siguientes valores -5.1 eV $<$ -4.2 eV $<$ -3.8 eV, respectivamente.
La molécula PET se adsorbe favorablemente tanto en ZnO pristina como dopado, Sin embargo, se observa que el Co como impureza sustitucional no mejora la adsorción de PET sobre ZnO. Por tal motivo actualmente se está evaluando al cobalto como impureza intersticial.

Referencias:

[1] N. Singh, D. Hui, R. Singh, I. P. S. Ahuja, L. Feo, F. Fraternali, Compos. Part B Eng. 1–14 (2016).
[2] Khoonkari, M., Haghighi, A.H., Sefidbakht, Y., Shekoohi, K., Ghaderian, A.Int. J. Polym. Sci. (2015). DOI
[3] Henry CR. In: Heiz U, editor. In: Landman U, editor. Nanocatalysis. Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg; 2007. p. 245.
[4] L. Bartolome, M. Imran, B. G. Cho, D. H. Kim; Mater. Recycl.-Trends Perspect. 65–84 (2012).
[5] Cynthia A. Fuentes, María V. Gallegos, Juan R. García,Jorge Sambeth, Miguel A. Peluso. Waste

and Biomass Valorization **11**, 4991 (2020).

Efecto en las propiedades electrónicas de defectos puntuales y lineales en CeO_2

• Walter G. Reimers,[1] C. Romina Luna,[1] Hernan Seitz,[1] Alfredo Juan [1]

[1] *IFISUR, Universidad Nacional del Sur, CONICET, Departamento de Física, Av. Alem 1253, 8000 Bahía Blanca, Argentina*

Los defectos gobiernan en gran medida las propiedades electrónicas y ópticas de los materiales, particularmente de los óxidos. Los defectos ofrecen sitios potencialmente activos para la adsorción de átomos y/o moléculas, ya que sirven como centros de carga que controlan el carácter donante o aceptor del material. En la naturaleza los defectos más comunes son: defectos puntuales, e.g. vacancias, y defectos lineales. Para comprender la física y la química de las superficies de óxidos se debe estudiar la variedad de defectos de la red. Es decir, se debe comprender los efectos de los defectos en las propiedades fisicoquímicas de la superficie[1].
El óxido de cerio (CeO_2) posee una alta estabilidad térmica, es capaz de prevenir envenenamiento de catalizadores y posee una importante capacidad de almacenar oxígeno. Por ello, CeO_2 es actualmente utilizado en varias áreas tecnológicas "amigables" con el medio ambiente, en catálisis, pilas de óxido sólido y sensor de gases [2].
En este trabajo se estudian vacancias de oxígeno con estado de carga neutra(VO^0) y positiva (VO^{+2}) y "escalones" en CeO_2. Se analizan el efecto de estos defectos en el magnetismo, ancho de banda prohibida y función trabajo.
Se realizaron cálculos utilizando la Teoría del Funcional de la Densidad, DFT (GGA) implementada por el código VASP con un modelo periódico y una base de ondas planas [3]. La vacancia de oxígeno en CeO_2 (111) se modela quitando un átomo de oxígeno en la capa superior de la superficie. El estado de carga $q = +2$ se simula removiendo 2 e^- del sistema. Por otro lado, para el modelado del defecto tipo "escalón" se utilizó el corte CeO_2 (331).
Los resultados obtenidos muestran un comportamiento semiconductor tipo p para los 4 sistemas en estudio. Las superficies CeO_2 (111) y (331) tienen un valor de momento magnético de 0.1 μ_B. Se observa que la presencia de vacancias de oxígeno en CeO_2 (111) produce un incremento del mismo, siendo 0.9 μ_B y 0.8 μ_B para VO^0 y VO^{+2} , respectivamente. El valor de banda prohibida para CeO_2 (111) es de 2.215 eV. Cuando hay vacancia de oxígeno neutra se observa una reducción del 58 %, mientras que para vacancia positiva la reducción es del 23 %. La superficie CeO_2 (331) posee un valor de banda prohibida similar al del corte (111), el valor obtenido es de 2.06 eV. Finalmente, respecto a la función trabajo la superficie CeO_2 (111) tiene un valor de 6.76 eV y los defectos VO^0 (6.07 eV) y "escalón" (5.38 eV) llevan una reducción de esta magnitud, mientras que VO^{+2} produce un importante incremento de la misma (12.8 eV).
En este trabajo, se pudo observar que los defectos puntuales inducen un aumento en el valor del momento magnético. Por otro lado, se encuentra una reducción en el valor de banda prohibida, independientemente de la dimensionalidad del defecto.

Referencias:

[1] *Defects at Oxide Surfaces* ,Chapter 2, ISBN: 978-3-319-14367-5.
[2] Patrick R. L. Keating *et al.*, J. Phys. Chem. C **116**, 2443 (2012).
[3] https://www.vasp.at/

Estudio de las propiedades de ZnO obtenido de pilas agotadas a través del método de Pechini

• María V. Gallegos,[1] Jorge E. Sambeth,[1] Laura Cristina Damonte[2]

[1] *CINDECA, CONICET, Fac.de Cs.Exactas, UNLP*
[2] *Instituto de Fisica La Plata, CONICET-UNLP, La Plata*

El óxido de zinc (ZnO) es un material interesante con diversas aplicaciones, tales como: catálisis, electrónicas, celdas solares, sensores, acústicas, etc. La versatilidad de este material está relacionada con sus propiedades estructurales y texturales, las cuales dependen de los métodos de síntesis usados [1,2].Entre ellos, el método de Pechini es un proceso fácil, sencillo, eficiente y rápido para la síntesis de nanopartículas cristalinas y estables. Los polvos obtenidos de esta manera son extremadamente puros y muy homogéneos en comparación con los preparados por métodos convencionales [3]. En dicha síntesis, se usa un polihidroxi alcohol (etilenglicol) y un ácido hidroxicarboxílico (ácido cítrico). Estos reactivos forman una red polimérica en la que los iones metálicos se distribuyen uniformemente. Durante la etapa de calcinación en el proceso de síntesis, la red polimérica colapsa formando un óxido metálico. El Zn forma parte de las pilas alcalinas, entonces la posibilidad tecnológica de recuperar el Zn como ZnO brinda una solución ambiental. En este trabajo, nos proponemos recuperar los iones Zn 2+ de pilas agotadas usando diferentes ácidos. A partir de las soluciones obtenidas, se pretende sintetizar ZnO a través del método de Pechini. Se estudiarán las propiedades estructurales y texturales de estos óxidos recuperados a través de difracción de rayos X (DRX) y microscopía electrónica de barrido (SEM). Se analizarán sus propiedades ópticas mediante espectroscopia UV-vis por reflectancia difusa analizando el efecto de los diferentes ácidos utilizados en el proceso de recuperación de iones Zn2+.

Referencias:

[1] V. Gurylev, and T. Pyng Perng, J. Eur. Ceram. Soc. **41**, 4977 (2021).
[2] B. G. Shohany, and A. K.Zak Ceram. Int. **46**, 5507 (2020).
[3] E. S. Rodrigues, M. S. Silva, W. M. Azevedo, S. S. Feitosa, A. Stingl, and P. M. A. Farias. App. Phys. A **125**, 504 (2019).

Estudio del tamaño de grano antes y después de la recristalización en una aleación Al-Mg-Si

• Agustina Alexa Di Rocco,[1] Victoria Noseda Grau,[1,2] Sebastián Jodra[1]

[1] *Instituto de Física de Materiales de Tandil - Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires*
[2] *Centro Atómico Bariloche - CONICET, Comisión Nacional de Energía Atómica*

La caracterización del tamaño de grano en aleaciones metálicas es fundamental en metalurgia física debido a que en general el tamaño de grano afecta las propiedades mecánicas del material [1-2]. A su vez los bordes de grano pueden incidir en la formación de partículas de segunda fase, las cuales se estudian fuertemente en aleaciones termoenvejecibles debido a ser las responsables del deseado efecto termoendurecedor[3]. En este trabajo se estudia el tamaño de grano en una aleación de Al-Mg-Si, antes y después de ser recristalizada. Utilizando pulido mecánico y ataque químico se logró revelar macroscópicamente el tamaño de grano de la aleación sin recristalizar y recristalizada. Se observaron y cuantificaron inhomogeneidades en el tamaño de grano original de la pieza (en el estado que posee de fábrica). Al comparar el área promedio de granos pertenecientes a los distintos extremos de la pieza sin recristalizar se obtuvo una diferencia del 92,19 %, y sólo una diferencia del 11,11 % entre las regiones de estudio correspondientes a la pieza recristalizada. A través de tratamientos termomecánicos se logró recristalizar la aleación obteniendo un grano homogéneo de diámetro promedio de 0,032 mm en la región de la punta y 0,035 mm en la región cola.
A su vez, se realizó un primer estudio del efecto del tamaño de grano en la formación de las fases metaestables características de las aleaciones Al-Mg-Si utilizando Calorimetría Diferencial de Barrido (DSC). En las aleaciones de este tipo se forman distintos conglomerados y fases cuya secuencia de precipitación depende de la temperatura, composición y de la historia termo-mecánica [4-7]. En trabajos previos sobre la aleación bajo estudio, se identificó a partir de observaciones TEM, μHV y DSC, la formación de las fases metaestables β"y β'como fases predominantes en el rango de temperatura entre 433 y 573 K [7-8].
En los termogramas obtenidos durante el calentamiento a partir del material en estado de solución solida sobresaturada (SSSS), las fases β"y β'se identifican como dos picos exotérmicos consecutivos [9-11], de los cuales analizamos las áreas, que se vinculan con la entalpía de formación de las fases, y la temperatura del máximo del pico (Tp). En la comparación de los termogramas para los distintos tamaños de grano, antes y después de la recristalización, se encontraron algunas diferencias sutiles que nos podrían indicar que las formaciones de las fases son sensibles al tamaño de grano.

Referencias:

[1] R.W.Cahn, P.Haasen, E.J.Kramer, Mater. Sci. Technol. **8** Alemania: VCH, (1996).
[2] W. F. Hosford, *Mechanical behavior of materials*. New York: Cambridge University Press, (2005).
[3] E. J. Mittemeijer, *Fundamentals of Materials Science*, Springer, Berlin Heidelberg (2010).
[4] G. A. Edwards, K. Stiller, G. L. Dunlop, M. J. Couper, Acta Materialia **46**, 3893 (1998).
[5] M. Murayama, K. Hono, W. F. Miao and D. E. Laughlin, Metallurgical and Materials Transaction A **32**, 239 (2001).
[6] C. Ravi, C. Wolverton, Acta Mater. Vol. **52**, 4213 (2009).
[7] Noseda Grau, V. (2020). *Transformaciones de fase en una aleación Al-Mg-Si* (Tesis doctoral). Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires.
[8] A. Cuniberti, A. Tolley, M. V. Castro Riglos, R. Giovachini; Mater. Sci. Eng. A **527**, 10, 5307 (2010)1.
[9] Edwards, G. A., Stiller, K., Dunlop, G. L., Couper, M. J. Acta Mater **46**, 3893 (1998).
[10] Doan,L. C.,Ohmori, Y., Nakai, K. Mater. Trans, JIM, **41**, 300 (2000).
[11] Esmaeili, S., Lloyd, D. J., Poole, W. J. Acta Mater. **53**, 5257 (2005).

Simulaciones atomísticas de propiedades mecánicas y termodinámicas en metales y aleaciones

• Facundo Arriaga,[1] Fernando Gabriel Lanzini,[1,2] Osvaldo Fornaro[1,2,3]

[1] *Instituto de Física de Materiales Tandil. Facultad de Ciencias Exactas. Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires. Pinto 399 - 7000 Tandil*
[2] *CONICET*
[3] *CIFICEN (UNCPBA-CICPBA-CONICET), Pinto 399, 7000 Tandil, Argentina*

En este trabajo se implementaron técnicas de Estática Molecular (EM) y Dinámica Molecular (DM), para el estudio de fenómenos y propiedades de materiales relacionados con las líneas de investigación del grupo de trabajo de Propiedades Mecánicas y Transformaciones de Fase del Instituto de Física de Materiales Tandil (IFIMAT). Se consideraron dos aplicaciones de estas técnicas: **(i)** Estudio de las propiedades de bordes de grano (BG) en Cu y Al; **(ii)** Simulación de la transformación martensítica (TM) y las propiedades de memoria de forma en aleaciones de Ni-Al. Para ambas aplicaciones se utilizó el programa LAMMPS, el cual sintetiza los algoritmos necesarios para la aplicación de ambas técnicas [1,2]. Los potenciales interatómicos fueron modelados mediante el método EAM (Embedded Atom Method), utilizando las implementaciones de [3-5].
La técnica de EM fue aplicada al estudio de la energía de borde de grano (E_{BG}) en metales puros de estructura fcc, Cu y Al, variando la inclinación ϕ de forma simétrica entre las regiones a cada lado de la frontera sobre el eje $\langle 100 \rangle$. La minimización de la energía se realizó utilizando el método del gradiente conjugado. Se encontró que, para cada ángulo particular, variaciones en la configuración inicial llevan a diferentes valores finales de la energía de BG, siendo este conjunto de valores discreto y acotado. Se atribuye este fenómeno a la existencia de mínimos locales de la energía. Para ángulos de inclinación pequeños ($\phi < 15^o - 20^o$), la E_{BG} crece rápidamente en función del ángulo. Este comportamiento pudo ser adecuadamente descripto siguiendo el modelo propuesto por [6].
Como segunda aplicación, se utilizó el método de DM para el estudio de la transformación martensítica en Ni-Al. Se generaron diversas estructuras con contenidos de Ni de entre 50 y 74 % con estructura inicial B2, y se estudió la estabilidad de fases para diferentes temperaturas. Se encontró que las aleaciones con menor contenido de Ni permanecen en estructura B2 en todo el rango entre 10 y 900 K, mientras que aquellas con contenidos de Ni mayores se estabilizan en una estructura martensítica maclada, con estructura monoclínica. Partiendo de una aleación con 69 % de Ni a 10K, en estructura martensítica, se estudió su comportamiento durante un ciclo completo de carga/descarga y calentamiento/enfriamiento. Se pudo observar la histéresis térmica asociada con la transformación y retransformación entre la austenita y la martensita, al igual que el fenómeno de memoria de forma.

Referencias:

[1]LAMMPS. *Large-scale atomic/molecular massive parallel simulator*. http://lammps.sandia.gov, (2006).
[2] S Plimpton. *Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics*. Technical report, Sandia National Labs., Albuquerque, NM (United States), (1993).
[3] Y Mishin, MJ Mehl, DA Papaconstantopoulos, AF Voter, y JD Kress. *Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding, and embedded-atom calculations*. Phys. Rev. B **63**, 224106 (2001).
[4] Y Mishin, D Farkas, MJ Mehl, y DA Papaconstantopoulos. *Interatomic potentials for monoatomic metals from experimental data and ab-initio calculations*. Phys. Rev. B **59**, 3393 (1999).
[5] GP Purja Pun y Y Mishin. *Development of an interatomic potential for the Ni-Al system*. Philosophical Magazine, **89**, 3245 (2009).
[6] WT Read y W Shockley. *Dislocation models of crystal grain boundaries*. Phys. Rev. **78**, 275 (1950).

Aparición de estados de borde de Majorana en fondo de skyrmiones antiferromagnéticos

• Esteban Andres Iroulart,[1,2] Héctor Diego Rosales[1,2,3]

[1] *Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos, CONICET-UNLP*
[2] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata*
[3] *Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata*

Desde su descubrimiento, la superconductividad ha servido como inspiración para incontables nuevos conceptos y aplicaciones. Dentro de estos, está el descubrimiento de los superconductores topológicos. Estos albergan estados localizados de energía cero en sus bordes, conocidos como estados de borde de Majorana (MBSs, por sus siglas en inglés). Una motivación en la investigación de estos estados se deriva de su estadística no-Abeliana, una propiedad fundamental para su potencial uso en computación cuántica topológica. Prometedores avances en los MBSs se han reportado en nanocables y cadenas atómicas, que están predichos a presentar superconductividad topológica. En este trabajo, se estudió el acoplamiento de electrones en estado superconductor acoplados a una textura topológica de skyrmiones antiferromagnéticos con el propósito de estabilizar MBSs, empleando tanto condiciones de contorno periódicas como abiertas. Para ello, se utilizaron distintas configuraciones variando el campo magnético aplicado en la muestra, el llenado electrónico, el potencial químico, y el acoplamiento de Hund, utilizando a su vez distintas geometrías de la red. Se mostrarán los resultados preliminares dentro de las regiones estudiadas.

Estudio de la adsorción y difusión de átomos de H y O en presencia de átomos vecinos sobre Cu(100) aplicando métodos de DFT

• Elizabeth del Valle Gómez,[1] Lucía B. Avalle,[1] María Cecilia Giménez[1]

[1] *Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación, Universidad Nacional de Córdoba, Instituto de Física Enrique Gaviola CONICET-UNC*

El cobre es un material ampliamente estudiado y utilizado por lo que resulta importante comprender cómo interactúa con su entorno [1-3]. Se ha descubierto en los últimos años, que la parte catalíticamente activa de la superficie, puede ser el óxido metálico y no el metal en sí mismo, ya que en muchos casos, el metal se oxida durante la catálisis [4]. Resulta necesario saber cómo se deposita el oxígeno en la superficie limpia, cómo difunden los átomos adsorbidos en la superficie y cómo la superficie misma cambia a medida que se modifica el cubrimiento de átomos de oxígeno.
Para obtener un conocimiento más profundo sobre los mecanismos de oxidación a menor escala, estudiamos las estructuras y energías de adsorción de átomos de hidrógeno y oxígeno en presencia de vecinos sobre la superficie de $Cu(100)$, empleando el formalismo previsto por la teoría del funcional de la densidad (DFT). Se calculan también las barreras de difusión y se estiman las velocidades de difusión. Se encontró que el sitio $hollow$ resultó ser el sitio de adsorción preferencial para el H y O en la superficie de $Cu(100)$. Frente a la presencia de átomos vecinos de su misma especie, las interacciones laterales entre los átomos de H y O resultaron repulsivas, sin embargo, el O presentó energías de interacción más fuertes. La presencia de átomos de O preadsorbidos en la vecindad del sitio de partida disminuyó la barrera de difusión del O, lo que hace que éste sea más móvil en la superficie. Los procesos directos resultaron energéticamente más favorables que los procesos inversos, lo que indica la tendencia de los átomos de O a no estar juntos. A pesar de que la presencia de átomos de O preadsorbidos promueven la velocidad de difusión de los adsorbatos, el átomo de H difunde más velozmente que el átomo de O sobre la superficie de $Cu(100)$, siendo esta diferencia varios órdenes de magnitud superior.

Referencias:

[1] Wang, D. & Astruc, D. *The recent development of efficient Earth-abundant transition-metal nanocatalysts*. Chem. Soc. Rev. **46**, 816 (2017).
[2] Gawande, M. B.; Goswami, A.; Felpin, F.; Asefa, T.; Huang, X.; Silva, R.; Zou, X.; AZboril, R. & Varma, R. S. *Cu and Cu-Based Nanoparticles: Synthesis and Applications in Catalysis*. Chem. Rev. **116**, 3722 (2016).
[3] Gattinoni, C. & Michaelides, A. *Atomistic details of oxide surfaces and surface oxidation: the example of copper and its oxides*. Surf. Sci. Rep **70**, 424 (2015).
[4] Du, J.; Chen, Z.; Ye, S.; Wiley, B. J.; Meyer, T. J. *Copper as a Robust and Transparent Electrocatalyst for Water Oxidation*. Angew. Chem. **54**, 2073 (2015).

Nanoparticulas de Ag sintetizadas a partir de extractos vegetales depositadas ex-situ sobre sustratos de mica y oro

• Marta Eugenia Arias,[1,2] Lucía Bernardita Avalle,[2,3] Emmanuel Iván Martín Aguilera,[2,4] Ana Valeria del Valle Arroyo Nieto,[2,5] Ana Catalina Luque,[1] Mario Alberto Debes[1,6]

[1] *Facultad de Ciencias Naturales e IML - Universidad Nacional de Tucumán*
[2] *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad Nacional de Catamarca*
[3] *Instituto de Física Enrique Gaviola (CONICET-UNC)*
[4] *Yacimiento Minero Aguas de Dionisio (YMAD), Catamarca, Argentina*
[5] *Instituto de Educación Superior Estanislao Maldones, Catamarca, Argentina*
[6] *Instituto Superior de Investigaciones Biologicas, CONICET-UNT*

Se realizó la biosíntesis de nanopartículas de plata (*npAg*) a partir del extracto de *Duchesnea indica* (Andrews) Terchem. f. *indica* Focke para evaluar su potencial uso en la industria del agro considerando la resistencia del genotipo frente a diferentes patógenos que afectan el cultivo de frutilla (*Fragaria x ananassa*). El material vegetal empleado se encuentra conservado en el Banco de Germoplasma de Frutilla de la Universidad Nacional de Tucumán (BGF - UNT). La síntesis de *npAg* se basa en la reacción de compuestos presentes en el extracto vegetal (polifenoles y azúcares reductores) que actúan como agente reductor y estabilizante del ion Ag. El proceso denominado "síntesis verde" tiene como propósito disminuir al máximo el uso de químicos difíciles de manejar haciéndolo un producto menos contaminante en su uso. Se realizó la biosíntesis de npAg en una mezcla de reacción entre el extracto vegetal y diferentes concentraciones de una solución acuosa de $AgNO_3$ a temperatura ambiente [1, 2]. Las soluciones obtenidas en los diferentes ensayos fueron depositadas sobre sustrato de mica y oro, para la obtención de imágenes por Microscopía de fuerza atómica (Atomic Force Microscopy, AFM) (FLEX-BIO NANOSURF, FaCEN-UNCA). Se realizaron estudios complementarios de Microscopía Electrónica de Barrido (Scanning Electron Microscopy, SEM) y Espectroscopía Foto-electrónica de rayos-X (X-ray Photoelectron Spectroscopy, XPS) (LAMARX-UNC). Se observó una buena correlación entre los resultados obtenidos por SEM y AFM, detectándose la presencia de conglomerados de partículas bien definidas cuya distribución de tamaños se encuentra entre 10 y 200 μm. Los espectros de XPS en la región de energías de enlace de la plata muestran un doble pico con intensidades de Ag 3d 5/2 y Ag 3d 3/2 centrado en 369,4 y 375,4 eV. A partir de los ajustes se obtiene que el pico Ag 3d 5/2 se encuentra en todos los casos a (367,7 $\pm$ 0,2) eV. Esta energía de enlace puede atribuirse a la presencia de Ag formando óxidos [3]. Esta hipótesis es sustentada por la presencia de átomos de O formando óxidos metálicos como Ag_2O (BE: 529,2/529,9 eV). Es notable la variación en la distribución de los picos correspondiente al ajuste en las energías de enlace del oxígeno. Estas variaciones pueden asociarse a la presencia de especies hidroxilo y/o H_2O.

Referencias:

[1] Aguilera E.I.M.; Arroyo Nieto A.V. d V.; Avalle L.B.; Arias M.E.; Debes M.A.; Luque A.C. *Biosíntesis y caracterización de nanopartículas de plata (npAg) obtenidas a partir de hojas de frutillas silvestres.* 1ra Jornada Científica FACEN, 2019, Catamarca, Argentina.
[2] Arias, M.E.; Avalle, L.B.; Aguilera, E.I.M.; Arroyo Nieto A.V. d V.; Luque, A.C.; Debes M.A. *Biosíntesis y caracterización de nanopartículas de plata (npag) obtenidas a partir de hojas de frutillas silvestres.* XIV Jornadas Internas de Comunicaciones en Investigación, Docencia y Extensión de la FCN e IML-UNT, 4 y 5 de Diciembre 2019, Tucumán, Argentina.
[3] J. of Elect. Spectr. and Rel. Phen. **56**, 273 (1991).

Conductores de ion sodio vitreos y cerámicos en la era post-litio

• Rocío Salgado,[1] Soledad Terny,[1] Marisa Frechero[1]

[1] *Instituto de Química del Sur - Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca*

El desarrollo de materiales inorgánicos conductores de ion sodio para su utilización en SiBs (baterías de estado sólido de ion sodio) es hoy objeto de interés tanto en ciencia como en tecnología en la llamada era post-litio. Se buscan materiales cuya conductividad a temperatura ambiente supere los 10-3 S.cm-1 y que sean estables tanto en contacto con los materiales de los electrodos como con la atmósfera regular. Uno de los materiales conductor de ion sodio que se explora en la actualidad es el Na2Zn2TeO6 (NZTO) debido a que alcanza una conductividad a temperatura ambiente superior a 104 S.cm-1 y presenta una excelente estabilidad tanto química como electroquímica. Es interesante además que su temperatura de síntesis es mucho menor que la de otros materiales conductores de ion sodio como Na-4β/β" alúmina y el Na3Zr2Si2PO12 (con estructura tipo NASICON). En este trabajo buscamos sintetizar materiales de fórmula NZTO en estado amorfo y cristalino, dopando con iones divalentes para aumentar su conductividad a temperatura ambiente disminuyendo la energía de activación e incrementando la movilidad iónica mediante su modificación estructural. Los materiales obtenidos han sido caracterizados por difracción de rayos-X para determinar las características de la fase en el caso cristalino, la espectroscopia FTIR para comprender cómo el ordenamiento local tanto en las fases cristalinas como amorfas modifica la movilidad del portador y, el análisis calorimétrico utilizando DSC para determinar la presencia de cambios de fase y su estabilidad térmica. Particularmente el uso de la espectroscopia de impedancia nos permite evaluar la respuesta eléctrica macro y microscópica mediante el análisis de los denominados formalismos de la impedancia.

Contacto: rocio.salgado1997@gmail.com; Soledad.terny@uns.edu.ar; frechero@uns.edu.ar

Teorías efectivas de Dirac para aislantes topológicos unidimensionales

• Facundo Rigatuso,[1] Ariel Dobry[2]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura - Universidad Nacional de Rosario*
[2] *Instituto de Física de Rosario, CONICET-UNR*

En este trabajo estudiamos la emergencia de hamiltonianos Dirac en aproximaciones de baja energía para sistemas aislantes unidimensionales con topología no trivial y, proponiendo modelos efectivos, buscamos identificar para qué régimen de parámetros estos modelos caracterizan correctamente la estructura topológica del sistema original en la red y cómo puede calcularse el invariante que caracteriza la fase topológica del sistema. Recurriendo al modelo de Su-Schrieffer-Heeger (SSH) y haciendo uso de argumentos de la topología de bandas caracterizamos la presencia de fases con estados de borde robustos y comprobamos cómo estas teorías efectivas en el continuo pueden detectar y describir correctamente los estados de energía cero en la interfase (bordes). Aplicando estos resultados analizamos un modelo tipo escalera sin correlaciones formado por la hibridación asimétrica entre cadenas de orbitales s y p_x (sp-ladder). Ambos sistemas propuestos se resuelven numéricamente y analíticamente de forma exacta en los casos que sea posible. Tanto para el sistema sp-ladder como para el SSH comprobamos que un modelo efectivo obtenido de la linealización del hamiltoniano en la zona de baja energía es suficiente para detectar una interfase y obtener las soluciones de borde asociadas, pero no alcanza para calcular correctamente el invariante topológico en una fase determinada. Para ello verificamos que una expansión de segundo orden en el límite continuo permite retener la información sobre la caracterización topológica. Este resultado es de importancia para el posterior estudio de modelos fermiónicos topológicos con interacciones donde no es posible aplicar el sistema de clasificación de fases para sistemas fermiónicos de red e interesa saber cómo detectar las posibles fases topológicas. Incluimos un estudio detallado sobre los estados de borde del sp-ladder y sus soluciones analíticas para diferentes regimenes de parámetros que en la literatura previa no ha sido completamente abordado. En todos los casos comprobamos que la teoría de baja energía es un límite válido de las soluciones exactas en la red y que proveen la misma información que éstas sobre la topología de las bandas. La ecuación de Dirac en el régimen de baja energía permite obtener las soluciones de borde aún en el caso en que no es posible obtener una solución analítica general para cualquier rango de parámetros.

Recubrimientos nanoestructurados de ZnO y NiO producidos por sol-gel spray-pyrolysis

• Maria de los Angeles Bolino,[1,2] Diego Richard,[1,3] Matias R. Tejerina[2,3]

[1] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP*
[2] *Facultad de Ingeniería Universidad Nacional de La Plata*
[3] *Centro de Tecnologías de Recursos Minerales y Cerámica, CONICET*

Los films transparentes de óxidos de zinc y níquel han cobrado gran importancia en el ámbito científico y tecnológico por ser empleados para el desarrollo de componentes optoelectrónicos como celdas solares y LEDs, dispositivos fotónicos y filtros ópticos. Entre sus cualidades, se pueden mencionar alta transparencia, alta movilidad de electrones, amplio bandgap y bajo costo. En este trabajo presentamos resultados preliminares de un estudio de films cerámicos basados en óxidos de zinc (ZnO) y níquel (NiO) crecidos mediante la técnica sol-gel spray-pyrolysis bajo distintas condiciones de crecimiento y composición. Para caracterizar los materiales producidos se utilizaron técnicas experimentales (espectroscopía UV-Vis, microscopía SEM, DRX) y estrategias de modelado computacional (basadas en métodos de primeros principios). Se fabricaron recubrimientos monocapa y bicapa; y se analizaron resultados preliminares de la homogeneidad, espesor, estructura y transmitancia de los materiales.

Estudio DFT de la adsorción de diferentes especies de dopamina sobre óxido de grafeno

• Nicolás Domancich,[1] Ana Rossi Fernández,[2] Lorena Meier,[1] Silvia Fuente,[1] Norberto J. Castellani[1,3]

[1] *Instituto de Física del Sur - Universidad Nacional del Sur*
[2] *Instituto de Química del Sur - Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca*
[3] *Departamento de Física - Universidad Nacional del Sur*

Uno de los métodos más utilizados para producir láminas de grafeno se basa en la reducción química de óxido de grafeno (GO), en cuya superficie predominan grupos epoxi e hidroxilo [1]. Entre los reductores utilizados, se demostró que la dopamina actúa menos severamente que otros como la hidracina o NaBH4 [2]. En el presente trabajo se estudia la adsorción de diferentes formas de dopamina (DA) sobre la superficie de GO. Los presentes cálculos se basan en la teoría DFT y fueron implementados con el código VASP. Las cargas atómicas se calcularon según el método DDEC06. Se consideró la adsorción disociativa y no disociativa de las especies neutra (NDA), zwitteriónica (ZDA), protonada (PDA) y desprotonada (DPDA) de DA sobre un substrato de GO con un grupo epoxi (GO1) o un grupo hidroxilo (G(OH)1). Se observan adsorciones tanto asociativas como disociativas para las cuatro especies. La adsorción disociativa sobre GO1 implica la formación de un grupo hidroxilo, mientras que aquella sobre G(OH)1, la eliminación del grupo hidroxilo. Las especies ZDA y PDA, tanto en forma asociativa como disociativa, poseen más actividad adsortiva que DPDA y NDA. Esta actividad se puede relacionar con una mayor transferencia de carga electrónica hacia el substrato.

Referencias:

[1] S. Eigler, A. Hirsch, Angew. Chem. Int. **53**, 2 (2014).
[2] H.J. Shin, K.K. Kim, Adv. Funct. Mater., 2009, 1987, 19.

Adsorción de dopamina, ácido ascórbico y ácido úrico sobre grafeno perfecto y grafeno con divacancias: estudio DFT

• Ana Rossi Fernández,[1] Lorena Meier,[2] Norberto J. Castellani[2,3]

[1] *Instituto de Química del Sur-Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas*
[2] *Instituto de Física del Sur - Universidad Nacional del Sur*
[3] *Departamento de Física - Universidad Nacional del Sur*

Diversos métodos experimentales se han desarrollado para la determinación simultánea de dopamina (DA), ácido ascórbico (AA) y ácido úrico (AU). Entre ellos, el electroquímico ha recibido gran interés, por su sensibilidad, bajo costo y facilidad de operación [1]. No obstante, las señales de estas moléculas en los voltamogramas presentan superposición. Recientemente se ha propuesto el uso de grafeno como electrodo a fin de mejorar la detección de las mismas [2]. Los presentes cálculos se basan en la teoría DFT y fueron implementados con el código VASP. Se consideró la adsorción de DA, AA y AU sobre grafeno regular (G) y grafeno con una doble vacancia (GDV), de acuerdo a diferentes orientaciones adsorbato/substrato y posiciones relativas de los grupos funcionales de las moléculas. Se consideraron geometrias de adsorción paralelas y perpendiculares a los palnos basales de grefeno y grafeno con divacancias. Las orientaciones más favorables resultaron ser con las moléculas cuasi-coplanares a la superficie, con energías de enlace en el rango 0.45-0.75 eV. Se calcularon los momentos dipolares eléctricos para estas orientaciones y se evaluaron los valores relativos del potencial de oxidación (PO), calculados considerando procesos de oxidación desarrollados a partir de las diferentes especies adsorbidas, y comparados con resultados electroquímicos de CV y DPV. Se observa que en promedio la molécula de dopamina posee el valor más significativo de la componente perpendicular del momento dipolar y que los PO calculados, relativos a la molécula libre de DA, están en buen acuerdo con los resultados experimentales, mostrando la influencia de la configuración de adsorción.

Referencias:

[1] J. Ping *et al.*, Biosens. Bioelectron. **34**, 70 (2012).
[2] A. Manbohi, S.H. Ahmadi, Sensing and Bio-Sensing Research **23**, 100270 (2019).

Modelado teórico de fotocatalizadores basados en BiOX

• Silvia A. Fuente,[1,2] Ana B. Schvval,[2,3] Carlos Duran Álvarez,[4] Gabriela F. Cabeza,[2,5] Cecilia I. Morgade[1,2]

[1] *Facultad Regional Bahía Blanca - Universidad Tecnológica Nacional*
[2] *Instituto de Física del Sur - Universidad Nacional del Sur*
[3] *Departamento de Química - Universidad Nacional del Sur*
[4] *Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico, Universidad Nacional Autónoma de México*
[5] *Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur*

Los materiales fotocatalizadores prometen un amplio campo de aplicación en procesos de decontaminación de aguas residuales, purificación del aire y producción de energía limpia a través de la separación del agua en H_2 y O_2 entre otros. Los oxihaluros de bismuto (BiOX (X = F, Cl, Br,I) son compuestos semiconductores ternarios, los cuales presentan una alta actividad fotocatalítica bajo radiación ultravioleta (UV) o visible. Son, a la fecha, los menos estudiados. Se consideran de importancia ya que presentan mayor actividad fotocatalítica que el TiO_2, el cual es el referente comercial más utilizado en el campo ambiental. Poseen excelentes propiedades eléctricas y ópticas por lo cual se han convertido en una opción ideal como nuevos fotocatalizadores de luz visible [1]. Los BiOX cristalizan en una estructura tipo matlockita, con capas de Bi_2O_2, intercaladas por una doble capa de átomos de halógeno. El objetivo principal de este trabajo es realizar un modelo teórico de los mismos que se correlacione con los estudios experimentales existentes, a través del cual se pueda analizar su comportamiento como fotocatalizadores. Para representarlos se realizó un modelo teórico-cuántico basado en la teoría del funcional de la densidad (DFT-D3) [2], considerando la corrección de Grimme que tiene en cuenta las fuerzas de Van der Walls. Se utilizó el paquete comercial VASP [3] y la aproximación de slabs para representar superficies extendidas. Se focalizó en el modelado del bulk y la superficie (001) (por ser la más estable), para los cuatro halógenos. Para los cálculos se utilizó el funcional de correlaci'on e intercambio PBE y una energía de corte de 520 eV. Observando las energías totales de las diferentes terminaciones superficiales (X, O y Bi) para cada uno de los halógenos que conforman los diferentes BiOX, se llega a la conclusión de que las superficies terminadas en halógeno son las más estables. Los enlaces tipo puente hidrógeno que existen entre los halógenos son los más débiles y fáciles de romper para generar dichas superficies. Analizando las densidades de estado (DOS) se puede concluir que el borde superior de la banda de valencia en todos los casos es el mismo, el cual está relacionado con los potenciales de oxidación. El potencial de reducción está vinculado con el borde inferior de la banda de conducción, y se ve que en este caso el flúor es el más reductor.

Referencias:

[1] Wei Pingyu Y.Q., Guo Lin, Progress in Chemistry **21**, 1734 (2009).
[2] S. Grimme, J. Antony, S. Ehrlich, and S. Krieg, J. Chem. Phys. **132**, 154104 (2010).
[3] Kresse G., Hafner J., Phys. Rev. B **49**, 14251 (1994).

Estructura electrónica y anisotropía magnetocristalina del YCo_5 dopado con Sm

• Carlos Iván Zandalazini,[1,2] Eduardo A. Albanesi,[3] Marcos I. Oliva[1,2]

[1] *Universidad Nacional de Córdoba, Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación, Grupo Ciencia de Materiales, Córdoba Argentina*
[2] *Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, IFEG, Córdoba, Argentina*
[3] *Instituto de Física del Litoral - CONICET - Guemes 3450, 3000 - Santa Fe, Argentina*

La creciente demanda de imanes permanentes de alto rendimiento en aplicaciones como dispositivos para la conversión de energía, o en la industria automotriz, ha impulsado la búsqueda de materiales que presenten elevados valores de anisotropía magnetocristalina (MAE), manteniendo costos razonables para su empleo a escalas industriales. Entre los compuestos intermetálicos pertenecientes a la estructura cristalina $CaCu_5$ (RT_5 - grupo espacial #191), es el $SmCo_5$ el que presenta un mayor valor de MAE ($\sim$17 MJ/m^3), mientras que para el YCo_5, ésta es considerablemente menor ($\sim$7 MJ/m^3).
La motivación de este trabajo es estudiar el origen de la alta anisotropía del campo cristalino en estos compuestos intermetálicos. Por una parte, el YCo_5 se ubica como sistema base ideal para el desarrollo de nuevos imanes, ya que la ausencia de elementos con electrones 4f permite conseguir una mejor interpretación sobre el rol de los metales de transición (TM) en la anisotropía del sistema. Y por otra parte, el dopaje sustitucional posibilita analizar, localmente, efectos asociados al Sm que dan lugar al alto valor de MAE en el sistema. La mayor comprensión de éstos fenómenos ofrece información necesaria para eventuales dopajes (TM y/o R) que permitan alcanzar una mayor eficiencia energética a un menor costo de producción. Se presentarán resultados teóricos sobre el efecto del dopaje con Sm en las propiedades electrónicas y magnéticas del YCo_5. Se determinaron; densidades de estados (total y local), densidad de carga, anisotropía magnetocristalina, y los momentos magnéticos atómicos. Los cálculos fueron realizados en el marco de la teoría de la funcional densidad, empleando la aproximación de gradiente generalizado (GGA+PBE), y los denominados pseudopotenciales "open core", lo que permite conseguir una adecuada descripción de los orbitales fuertemente localizados que caracterizan a estos compuestos. En todos los casos estudiados se incluyó el acoplamiento espín-órbita.

Pseudopotenciales y parámetros de correlación en compuestos intermetálicos: un estudio sobre el cálculo de la anisotropía magnetocristalina en los sistemas YCo_5 y $SmCo_5$

• Carlos Iván Zandalazini,[1,2] Eduardo A. Albanesi,[3] Marcos I. Oliva[1,2]

[1] *Universidad Nacional de Córdoba, Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación, Grupo Ciencia de Materiales, Córdoba Argentina*
[2] *Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, IFEG, Córdoba, Argentina*
[3] *Instituto de Física del Litoral - CONICET - Guemes 3450, 3000 - Santa Fe, Argentina*

La descripción de la estructura electrónica en los compuestos intermetálicos, a partir de la teoría de la funcional densidad (DFT), ha presentado serias dificultades. En particular, en los cálculos de las propiedades magnéticas de compuestos con simetría cristalina $CaCu_5$ (RT_5 - grupo espacial #191), en donde se ha observado una importante dependencia con el método empleado para su estudio. Esto ha impulsado la búsqueda de aproximaciones alternativas para describir adecuadamente los estados fuertemente localizados que caracterizan estos compuestos.
En este trabajo se presentarán cálculos de las estructuras electrónicas de los compuestos YCo_5 y SmC_5, obtenidos a partir de implementar diferentes aproximaciones en el marco de la DFT; (a) empleando la aproximación de gradiente generalizado (GGA+PBE) convencional, (b) incluyendo las correcciones de Hubbard (DFT+U), y (c) empleando los denominados pseudopotenciales "open core". En el estudio se puso especial énfasis en la comparación de los cálculos de la anisotropía magnetocristalina, y momentos magnéticos, con sus correspondientes valores experimentales. En todos los casos estudiados se incluyó el acoplamiento espín-órbita.

Estudio ab initio sobre las propiedades termoeléctricas del SnS considerando diferentes estructuras cristalinas

• Carlos Iván Zandalazini,[1,2] Eduardo A. Albanesi,[3] Marcos I. Oliva[1,2]

[1] *Universidad Nacional de Córdoba, Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación, Grupo Ciencia de Materiales, Córdoba Argentina*
[2] *Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, IFEG, Córdoba, Argentina*
[3] *Instituto de Física del Litoral - CONICET - Guemes 3450, 3000 - Santa Fe, Argentina*

La capacidad de generar electricidad a partir del calor residual, sin emisión de gases ni piezas móviles, ubica a los materiales termoeléctricos (TE) como sistemas estratégicos para la utilización eficiente de la energía en un futuro próximo. La eficiencia de éstos materiales, para una determinada temperatura de trabajo, puede expresarse en términos de una figura de mérito (zT) que involucra el coeficiente Seebeck (S), la conductividad eléctrica (σ), y la conductividad térmica (κ) de dicho material. Recientemente, el valor zT más alto de los materiales TE conocidos se descubrió en el SnSe, lo cual ha sido asociado a su intrínseca característica de estructura cristalina (en capas) ortogonal. Pero el alto costo del Se, y su toxicidad, limitan su empleo en escalas industriales. Es en este sentido que, debido a las similitudes estructurales con el SnS, el bajo costo del S frente al Se, y además por no presentar toxicidad alguna, el SnS se ubica como material promisorio para el desarrollo de dispositivos termoeléctricos.
En este trabajo se presentarán cálculos de las propiedades termoeléctricas del SnS considerando diferentes estructuras cristalinas. Se determinaron S, σ, y κ para un rango de temperaturas (100-700 K) y para diferentes concentraciones de portadores (1E17-1E21 cm^{-3}). Además, para analizar el rol de la simetría del SnS en su eficiencia termoeléctrica, se contempló el cálculo de estas propiedades discriminando entre las diferentes direcciones cristalográficas del sistema. Los resultados muestran que la simetría del sistema es crítica para la eficiencia termoeléctrica del SnS, principalmente en lo que respecta a las concentraciones de los portadores de carga óptimas para alcanzar una alta eficiencia. Para el caso de la simetría del SnS que ha sido más estudiada (Pnma), parte de éstos resultados se pudieron comparar con datos experimentales obtenidos de la literatura, presentando una excelente correspondencia. Los cálculos de la estructura electrónica fueron obtenidos en el marco de la teoría de la funcional densidad, y para las propiedades termoeléctricas se empleó la teoría de transporte de Boltzman.

Efectos de la intercalación de litio en el espectro de excitación de valencia del grafito

• Santiago Mayorga Quarin,[1,2] Guillermo Eduardo Stutz,[1,2] Sergio Andrés Ceppi,[1,2] Manuel Otero,[3,4] Carla Belén Robledo,[3,4] Guillermina Leticia Luque,[3,4] Ezequiel Pedro Marcos Leiva,[3,4] Daniel Eugenio Barraco Díaz[1,2]

[1] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*
[2] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*
[3] *Instituto de Investigaciones Físico-Químicas de Córdoba, CONICET-UNC*
[4] *Departamento de Química Teórica y Computacional, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina.*

Este trabajo tiene como objetivo estudiar el espectro de excitación de electrones de valencia en muestras de grafito policristalino y grafito intercalado con litio en etapas 1 (LiC_6) y 2 (LiC_{12}), con el objeto de aportar información concerniente a cambios en la estructura electrónica del grafito cuando es utilizado como ánodo en baterías de ion-Li. Para llevar a cabo el objetivo se utiliza la técnica de dispersión inelástica de rayos X (IXS), la cual nos permite obtener información de las excitaciones de electrones de valencia en función de la energía transferida (ω) y del momento transferido ($\mathbf{q}$), y además por trabajar con rayos X duros nos permite obtener información de volumen, evitando problemas de contaminación o irregularidades en la superficie de las muestras. A bajo q los espectros IXS muestran dos picos característicos del espectro de excitaciones de valencia del grafito para $\mathbf{q}$ perpendicular al eje c. Dichos picos se asocian a excitaciones tipo plasmónicas que involucran electrones π (pico de baja energía) y $\pi + \sigma$ (pico de alta energía). Para q altos el pico de energía más baja deja de apreciarse, posiblemente debido a efectos de amortiguamiento asociados a transiciones interbandas $\pi \rightarrow \pi^*$ de baja energía. Ambos picos plasmónicos presentan una dispersión positiva en función de q, en acuerdo con cálculos ab initio de la función dieléctrica de grafito en el marco de la aproximación RPA (Phys. Rev. B 69, 245419, 2004). También se observó un corrimiento sistemático de los mismos hacia energías más bajas en función de la concentración de litio en el grafito. El desplazamiento debido a la intercalación de litio se vuelve más débil a medida que se aumenta q. Este desplazamiento en energía de los picos podría correlacionarse con la intercalación del litio entre distintos planos de grafeno en el grafito originando un aumento de la separación entre planos grafénicos dando como resultado una reducción de la interacción interplanar (efecto apantallamiento) y, como consecuencia, un desplazamiento de los picos plasmónicos hacia energías menores. Estos cambios observados en las estructuras espectrales, distinguibles en un experimento de IXS con una resolución usual del orden de 1eV, podrían ser candidatos adecudados de rasgos espectrales caracterísiticos para determinar el estado de litiación de un ánodo de grafito durante el ciclado de una batería de ion-Li.

Efecto Magnetocalórico en multicapas de LSMO

• Sebastian Passanante,[1,2,3,4] Leticia Granja,[1,4] Cecilia Albornoz,[1,4] Mariano Quintero[1,2,4]

[1] *Departamento de Física de la Materia Condensada, CAC, CNEA*
[2] *Escuela de Ciencia y Tecnología - UNSAM*
[3] *Instituto Sabato - Comisión Nacional de Energía Atómica*
[4] *Instituto de Nanociencia y Nanotecnología, CAC Buenos Aires, CNEA+CONICET*

El efecto magnetocalórico se conoce como el cambio en la temperatura de un material cuando aplicamos un campo magnético externo y presenta su máxima intensidad cuando la temperatura del sistema coincide con la temperatura de Curie (Tc). Si bien este efecto es conocido hace mucho tiempo, el interés en los últimos años creció debido a la posibilidad de utilizarlo para refrigeración a temperatura ambiente.
En particular, las manganitas presentan un EMC importante y se destacan por su flexibilidad a la hora de modificar sus propiedades magnéticas con diferentes estímulos, debido al fuerte acoplamiento entre los diferentes grados de libertad (electrónico, magnético, estructural).
En este trabajo se estudiaron sistemas de multicapas de La1-xSrxMnO3 (LSMO) crecidos mediante la técnica de ablación láser (PLD) sobre sustratos de Si/SiO2. Aprovechando que la Tc puede modificarse con la concentración de estroncio, se crecieron multicapas con x=0.12 y x=0.25, obteniendo capas con diferente Tc. De esta forma se consiguió un intervalo más amplio de temperatura donde el EMC es significativo. Además, estudiamos la importancia del orden de apilamiento de las capas, y se compararon los resultados obtenidos con películas delgadas de una sola capa de LSMO.

Características estructurales en torno a los canales iónicos en vidrios de óxido, su reconfiguración en el tiempo frente a la relajación estructural

• Juan Manuel Alonso,[1] Fabricio Orlando Sanchez Varretti,[2] Marisa Alejandra Frechero[3]

[1] *Grupo de Estudios Ambientales, Instituto de Matemática Aplicada San Luis, Universidad Nacional de San Luis, CONICET, Ejército de los Andes 95, 57 San Luis*
[2] *Facultad Regional San Rafael - Universidad Tecnológica Nacional*
[3] *Departamento de Química, Universidad Nacional del Sur, INQUISUR, CONICET, Av. Alem 153 (8000), Bahía Blanca, Argentina.*

En los electrolitos sólidos los portadores de carga móviles suelen desplazarse mediante saltos (hopping). En general, el número de sitios disponibles para tales saltos excede el número de iones móviles. Los conductores iónicos sólidos con desorden estructural pueden ser cristalinos o no cristalinos. Cuando son estructuralmente desordenados, tanto sea en cristales como en vidrios suelen mostrar una respuesta a la que a menudo se hace referencia como "respuesta dinámica universal" (específicamente cuando se la observa en la permitividad y en la conductividad). En los últimos años, espectroscopistas y teóricos han buscado la posibilidad de rastrear estos fenómenos hasta un origen común en la que el desorden estructural y la interacción iónica fueron reconocidos como candidatos para una causa común. Al intentar resolver el problema observamos que el proceso de relajación del salto, siendo físicamente obvio y conceptualmente simple, da una explicación consistente para tal respuesta dinámica universal. Sobre la base del modelo continuous random network (CRN) propuesto por Zachariasen en 1932, y utilizando dispersión de rayos X para obtener de la estructura de un vidrio de sílice al agregar modificadores de red como por ejemplo Na_2O, se encontró que el Na^+ creaba los oxígenos denominados no puente (NBO). En 1985, Greaves fue un paso más allá y definió la red aleatoria modificada (MRN) en la que los cationes modificadores formaban los entonces llamados canales iónicos. Este modelo se usa aun hoy en día para explicar los procesos dinámicos de los portadores de carga y también, propiedades del material, como por ejemplo, la viscosidad reducida de los vidrios modificados que se atribuye a las fuerzas de cizalla que se supone que ocurre a lo largo de las interfaces entre los canales iónicos y regiones de la red covalente, entre muchas otras. Dada la importancia de comprender en mayor detalle sus características estructurales, en este trabajo usamos la dimensión finita y los grafos conexos ralos (connected sparse graphs) para estudiar las particularidades de la matriz vítrea en torno a los canales iónicos en vidrios de metasilicato de litio y metasilicato de litio y potasio. Buscando revelar los cambios que llevan a su reconfiguración en el tiempo frente a la relajación estructural, la concentración de iones, la mezcla de iones y la temperatura.

Estudio de la superficie de nitruro de carbono grafito / grafito pirolítico altamente orientado mediante microscopía Raman y XPS

• Cesar G. Gomez,[1] Omar E. Linarez Pérez,[2] Lucía B. Avalle,[3] Mariana Isabel Rojas[4]

[1] *Instituto de Investigación y Desarrollo en Ingeniería de Procesos y Química Aplicada (IPQA), CONICET, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba*
[2] *INFIQC (CONICET), Dpto. de Fisicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba. Ciudad Universitaria. 5000 Córdoba. Argentina.*
[3] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*
[4] *INFIQC-Conicet. Facultad de Ciencias Químicas. Departamento de Química Teórica y Computacional. Universidad Nacional de Córdoba. Argentina.*

Recientemente se desarrolló un nuevo sensor que consiste en una superficie de grafito pirolítico altamente orientado (HOPG) modificado con una película delgada de nitruro de carbono grafito ($g - C_3N_4$). El $g - C_3N_4$ se sintetizó mediante tratamiento térmico de precursores nitrogenados. Posteriormente se exfolió, se suspendió en etanol para depositar mediante drop-casting sobre la superficie del HOPG [1]. Mediante microscopía electrónica de barrido (SEM) se observó que la película es discontinua formada por aglomerado de partículas, la cual cubre sólo el 15% de la superficie. Para estudiar la estructura electrónica de los átomos que componen la superficie, se realizó un mapa en un área de 3.02 nm x 2.07 nm, aproximadamente el 22% de área del electrodo, mediante espectroscopia fotoelectrónica de rayos X (XPS). Cada región de incidencia en el mapa cubre un área de 400 μm de diámetro con una penetración de entre 6-10 nm. Debido a que la película es más delgada, siempre se observan las señales correspondientes al substrato. Por lo que hay regiones donde las señales del HOPG son mayoritarias y hay regiones donde las señales $g - C_3N_4$ son mayoritarias. Posteriormente, se estudió la densidad de defectos en superficie para lo cual se realizaron espectros Raman, a diferentes frecuencias de excitación en el visible: 632.8 nm (rojo) y 514.5 nm (verde). Se analizaron diferentes regiones en la superficie del HOPG y sobre la película de $g - C_3N_4$. Las señales mostraron una baja densidad de defectos en HOPG y altas densidad de defectos en $g - C_3N_4$. Se sabe que la lámina de tri-s-triazina posee una distribución periódica de poros en su estructura, además, hay defectos de borde que provienen del proceso de exfoliación química, los cuales se evidencian en las señales Raman. Las superficies de HOPG y HOPG/ $g - C_3N_4$ se emplean como electrodos para la detección de peróxido de hidrógeno. Los estudio realizado a las superficies, permitieron estimar la cantidad de sitios activos en ambas superficies y calcular la frecuencia de recambio (TOF). Los sitios activos en HOPG son los defectos tipo escalón, mientras que para HOPG / $g - C_3N_4$ el número de sitios activos se incrementan considerablemente debido a la presencia de N en la superficie y defectos de borde. Los valores de TOF son: 5.677 s-1 y 0.266 s-1 para HOPG y HOPG/ $g - C_3N_4$, respectivamente. Lo que indica que la reacción presenta una cinética más lenta sobre HOPG/ $g - C_3N_4$ que sobre HOPG [2].

Referencias:

[1] C.G. Gomez, A.M. Silva, M.C. Strumia, L.B. Avalle, M.I. Rojas, *The origin of high electrocatalytic activity of hydrogen peroxide reduction reaction by g-C3N4/HOPG sensor*, Nanoscale **9**, 11170 (2017).
[2] C.G. Gomez, O.E. Linarez Pérez, L.B. Avalle, M.I. Rojas. *Morphological and electrochemical characterizations of a carbon nitride / highly oriented pyrolytic graphite electrode.* J. Electroanal. Chem. in press (2021).

Simulaciones computacionales de la reacción de oxidación de indol sobre grafeno

• Danna Villca Centellas,[1] Jorge A. Velasco,[1] Mariana Isabel Rojas[2]

[1] *Universidad Mayor de San Andrés, La Paz, Bolivia.*
[2] *INFIQC-Conicet. Facultad de Ciencias Químicas. Departamento de Química Teórica y Computacional. Universidad Nacional de Córdoba. Argentina.*

La enterobacterias como le escherichiacoli liberan indol [1-2]. Por lo cual un sensor para la detección de indol es de gran importancia para la seguridad alimentaria. En la manufactura de (bio)sensores se emplean materiales carbonosos porque estos materiales poseen una gran área superficial y bajo costo comercial.
En este trabajo se estudió la adsorción de indol sobre una lámina de grafeno mediante simulaciones atomísticas de primeros principios empleando el código Quantum ESPRESSO [3] con funcionales GGA (PBE) y pseudopotenciales Ultra Soft. La celda unidad es hexagonal 12.33 Å x 12.33 Å x 15 Å con condiciones periódicas de contorno en x, y, z. La lámina de grafeno consta de 50 átomos de C. La molécula de indol es aromática y se adsorbe en posición paralela a la superficie mediante interacciones de van der Waals. Se determinaron las energías de adsorción y el sitio de adsorción preferencial en el cual la energía de adsorción es de -0.97 eV. Para diferentes concentraciones de indol en solución entre 0.1 a 100 μM, se simuló el cubrimiento de la superficie mediante una isoterma de adsorción de Langmuir, observándose cubrimientos mayores al 0.90.
Para el estudio de la reacción de oxidación de indol (ROI) se propone un mecanismo, se optimizan los caminos de mínima energía y las energías de activación de cada una de las etapas. Finalmente, se simula el voltagrama correspondiente al pico de oxidación en la aproximación de campo medio.

Referencias:

[1] Y. Zhou, M. Ding, W. Lyu, Q. Zhen, H. Chen, M. Jiang, Y. Ding, X. Zhang. *A sensitive electrochemical method for indole based on the signal amplification strategy by gold/iron-oxide composite nanoparticles*. Analytica Chimica Acta, **1142**, 56 (2021).
[2] M. Jin, X. Zhang, Q. Zhen, Y. He, X. Chen, W. Lyu, R. Han, M. Ding. *An electrochemical sensor for índole plasma base on MWCNTs-chitosan modified screen-printed carbon electrode*. Biosensors and Bioelectronics **98**, 392 (2017).
[3] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car et al, J. Phys. Condens. Matter **21**, 395502 (2009).

Simulaciones computacionales de la adsorbión de melamina sobre grafeno

• Fernando R. Pantano,[1] Mariana Isabel Rojas[1]

[1] *Universidad Nacional de Córdoba, Facultad de Ciencias Químicas, Departamento de Química Teórica y Computacional. INFIQC-CONICET*

En los últimos años se ha despertado un interés creciente por el estudio del grafeno y sus aplicaciones. Es un material sorprendente, casi transparente, de un átomo de espesor, más resistente que el acero y de alta conductividad eléctrica y térmica [1]. Por ser un material carbonoso se emplea en la construcción de biosensores favoreciendo la adsorción de biomoléculas [2]. En este trabajo se lleva a cabo el estudio computacional de la adsorción de una molécula de melamina sobre grafeno pristino o con defecto de tipo Stone-Wales (5-7-7-5), empleando el código Quantum ESPRESSO basado en la teoría del funcional de la densidad (DFT), con funcionales tipo GGA (PBE) y pseudo potenciales Ultra Soft. La celda unidad es hexagonal 12.33 Å x 12.33 Å x 15 Å con condiciones periódicas de contorno en x, y, z. La lámina de grafeno consta de 50 átomos de C. Se estudiaron diferentes sitios de adsorción y se calcularon las energías de adsorción en cada uno de ellos, para determinar el sitio de adsorción preferencial. La molécula de melamina por ser una amina aromática, se ubica en posición paralela a la superficie. La interacción adsorbato / substrato es no-específica, de tipo van der Waals. Tanto la molécula como la lámina de grafeno, se curvan (una cóncava y la otra convexa), debido a la carga transferida entre ambas. Las mayores deformaciones se observaron en el caso de la adsorción sobre la lámina con defecto Stone-Wales.

Referencias:

[1] N.M.R, Peres, Rev. Mod. Phys. **82**, 2673, 2016 (2010).
[2] D. López Carballeira, N. Ramos-Berdullas, I. Perez-Juste, J. L. C. Fajín, M. N. D. S. Cordeiro and M. Mandado, Phys. Chem. Chem. Phys. **18**, 15312 (2016).

Determinación del estado de oxidación de partículas de Ag depositadas sobre sustratos de Ti/TiO2

• Lucía Bernardita Avalle,[1] Fabiana Yolanda Oliva,[2] María Cecilia Gimenez,[1] Luis Reinaudi[2]

[1] *Instituto de Física Enrique Gaviola (CONICET-UNC)*
[2] *Instituto de Investigaciones Físico-Químicas de Córdoba, CONICET-UNC*

La modificación de películas delgadas de Ti/TiO_2 por nanopartículas metálicas ha recibido considerable atención, principalmente debido a su importancia en aplicaciones de sistemas a nanoescala [1,2]. En consecuencia, el conocimiento de las interacciones entre las nanopartículas metálicas y el soporte es esencial para predecir la forma y el tamaño de las estructuras depositadas, así como para evaluar el grado de transferencia de carga relacionada con la interacción metal-soporte. En el presente trabajo, se determinaron los diferentes estados de oxidación del Ti, Ag y O en muestras de óxido de titanio formado potenciodinámicamente a partir de titanio depositado sobre vidrio mediante Espectroscopía Foto-electrónica de rayos-X (X-ray Photoelectron Spectroscopy, XPS) (LAMARX-UNC) . La formación y estabilización del óxido se realizó en soluciones de $HClO_4$ 0,010 M por Voltamperometría Cíclica (VC) entre -1,0 y 0,8 V vs. ECS; bajo estas condiciones se prepararon superficies cuyo espesor inicial del óxido de titanio es inferior a 2 nm [3]. Posteriormente, se modificó la superficie del óxido con partículas de Ag depositadas espontánea y electroquímicamente. Los depósitos electroquímicos de partículas de Ag se realizaron en una solución de $AgNO_3$ 0,002 M a dos potenciales diferentes -0,55 V y -0,65 V vs. ECS, durante 30 s. Los espectros de XPS sin decapar para las muestras de Ti/TiO_2 sin modificar muestran la señal para los picos de Ti 2p 3/2 a 558,5 eV, y Ti 2p 1/2 a 465,0 eV, correspondientes al Ti(IV) en el óxido. En los espectros de XPS sin decapado para las muestras de $Ti/TiO_2/Ag$ se observaron dos picos característicos de los estados Ag 3d 3/2 y Ag 3d 5/2 a 374,3 eV y 368,3 eV, sugiriendo la presencia de Ag metálica en la superficie [4]. Un estudio pormenorizado en la zona de energías del oxígeno reveló un pico asimétrico cuya deconvolución muestra componentes compatibles con la presencia de (hidr)óxido de titanio. En las superficies modificadas tanto con Ag espontánea como electrodepositada, se observó el incremento en una componente asociada energéticamente al SiO_2 (sustrato de vidrio conductor). Con el propósito de estudiar la variación de la composición del sustrato a distintas profundidades, se realizaron decapados por bombardeo con iones Ar^+ de las muestras a diferentes energías y tiempos de exposición. Se realizaron estudios teóricos, mediante cálculos ab-initio, de adsorción de átomos de plata sobre superficies (100) y (001) de rutilo, comparando las energías y distancias de adsorción en diferentes sitios y realizando cálculos de DOS, para analizar las propiedades electrónicas. Las tendencias observadas se compararon con los resultados experimentales.

Referencias:

[1] Mathew Snehamol, Ganguly Priyanka, Rhatigan Stephen, Kumaravel Vignesh, Byrne Ciara, Hinder Steven J., Bartlett John, Nolan Michael, Pillai Suresh C. App. Sci. **8**, 2067 (2018).
[2] M.G.Méndez-Medrano, E. Kowalska, A. Lehoux, A. Herissan, B. Ohtani, D. Bahena, V. Briois, C. Colbeau-Justin, J.L. Rodríguez-López, H. Remita J. Phys. Chem. C **9**, 5143 (2016).
[3] Filippin F.A., Linarez Pérez O.E., López Teijelo M., Bonetto R.D ., Trincavelli J., Avalle L.B. Electrochimica Acta **129**, 266 (2014).
[4] Bazant, P., Kuritka, I., Munster, L. *et al.*, *Microwave solvothermal decoration of the cellulose surface by nanostructured hybrid Ag/ZnO particles: a joint XPS, XRD and SEM study.* Cellulose **22**, 1275 (2015).

Análisis de polimorfismos en arcillas caoliníticas a través de cálculos ab initio

• Diego Richard,[1,2] Nicolás Rendtorff[1,2]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas - Universidad Nacional de La Plata*
[2] *Centro de Tecnología de Recursos Minerales y Cerámica*

El análisis de las propiedades elásticas de arcillas reviste un fuerte interés por su aplicación en sismología y estudio de *shales*. Experimentalmente existe dificultad para analizar estos materiales *bulk*, dado que naturalmente existen como partículas finas y su composición varía por estar acompañados por otros minerales (tales como cuarzo, calcita y otras arcillas). Es por eso que, por ejemplo, para el caolín existe una amplia dispersión de valores del módulo de elasticidad en la literatura.
En este trabajo se presentan resultados preliminares de cálculos basados en la Teoría de la Funcional Densidad (DFT) para estudiar las curvas energía vs volumen en distintos politipos de arcillas caoliníticas. Esta metodología ha sido recientemente aplicada en sistemas similares basados en la caolinita [1]. Se pretende aquí extender dichos estudios para analizar la respuesta de cada estructura a la aplicación de presión hidrostática, y determinar las condiciones de equilibrio y el módulo de compresibilidad de cada arcilla. Asimismo, la relación entre las distintas curvas y su comparación con los datos experimentales permiten inferir posibles presiones de transición entre fases.

Referencias:

[1] Richard & Rendtorff, Applied Clay Science **169**, 67 (2019). DOI

Cristalización de skyrmiones en la red de kagome a partir de un líquido de spin quiral

• Hector Diego Rosales,[1,2,3] Flavia A. Gómez Albarracín,[1,2,3] Ludovic Jaubert,[4] Pierre Pujol[5]

[1] *Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata*
[2] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata*
[3] *Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos, CONICET-UNLP*
[4] *CNRS, Université de Bordeaux, LOMA, UMR 5798, 33400 Talence, France*
[5] *Laboratoire de Physique Theorique, IRSAMC, CNRS and Universit e de Toulouse, UPS, F-1062 Toulouse, France*

Desde hace ya varios años, las excitaciones topológicas han sido un tema de constante investigación en materia condensada. En este contexto skyrmiones [1] y semi-skyrmiones (merones) [2], con propiedades similares a partículas, son representantes de tales estructuras y se utilizan en el diseño de dispositivos magnetoeléctricos, ópticos y mecánicos mediante el control de las fases topológicas. En este trabajo, exploramos la aparición y estabilidad térmica de skyrmiones a partir de un fondo líquido de espín quiral, y la posterior cristalización del gas de skyrmiones en la red de kagome. En primer lugar, empleando simulaciones numéricas de Monte Carlo a gran escala, mostramos que el efecto combinado de interacciones antisimétricas y degeneración macroscópica conduce a una gran variedad de fases topológicamente no triviales incluyendo bimerones, skyrmiones, líquidos de skyrmiones y líquidos de espín quiral. Finalmente, mostramos que el proceso de cristalización de skyrmiones posee las mismas características presentadas en la teoría KTHNY [3] observándose una transición intermedia a una fase hexática con orden de traslación de corto alcance y cuasi-largo alcance de órden orientacional.

Referencias:

[1] Mühlbauer, S. *et al.*, *Skyrmion lattice in a chiral magnet.* Science **323**, 915 (2009).
[2] Gao, S., Rosales, H.D., Gómez Albarracín, F.A. *et al.*, Nature **586**, 37 (2020).
[3] B. I. Halperin and D. R. Nelson, Phys. Rev. Lett. **41**, 121 (1978); D. R. Nelson and B. I. Halperin, Phys. Rev. B **19**, 2457 (1979); A. P. Young, Phys. Rev. **B** 19, 1855 (1979).

Estudio teórico de nanopartículas de Pt soportadas sobre nanotubos de carbono: adsorción y disociación de agua

• José Nuñez,[1] Gustavo Daniel Belletti,[1] Frederik Tielens,[2] Paola Quaino[1]

[1] *Instituto de Química Aplicada del Litoral (CONICET - UNL)*
[2] *General Chemistry (ALGC), Materials Modelling Group, Vrije Universiteit Brussel*

El platino es ampliamente conocido por su alta actividad catalítica en reacciones de interés tecnológico y científico como la reacción de disociación de agua, la reacción de hidrógeno, entre otras. En este trabajo queremos hacer una contribución sobre el comportamiento de algunas estructuras que involucran al platino como catalizadores. A primera vista, este enfoque en el platino puede parecer extraño, ya que es un buen catalizador. Sin embargo, hay dos buenas razones para examinar el platino. En primer lugar, las nanoestructuras suelen incluir mucho menos de este metal precioso que los electrodos de material masivo, por lo cual las nanoestructuras pueden ser más económicas. En segundo lugar, aunque reacciones como la de hidrógeno y la de oxígeno ocurren rápidamente en el platino, todavía parece haber margen para una mejora sustancial. En este contexto, una opción es el empleo de materiales con bajas proporciones de Pt soportados sobre sustratos carbonosos como los nanotubos de carbono (CNT), los cuales han mostrado interesantes propiedades que les permiten ser considerados materiales de soporte. Si bien la modificación de CNTs con Pt ha sido estudiada en diversos trabajos teóricos [1], ninguno presenta un análisis sistemático de la adsorción gradual de átomos de Pt sobre los CNTs, y la respuesta reactiva de estos materiales frente a ciertas reacciones de interés.
En el presente trabajo se han utilizado métodos computacionales ab-initio para modelar la adsorción de átomos, dímeros y trímeros de Pt sobre CNTs de quiralidad (5,5), para estudiar la estabilidad, geometría y magnetización total de estos sistemas. Además, su reactividad fue evaluada sistemáticamente a través de la adsorción y descomposición de moléculas de agua.
Resultados preliminares indican que la adsorción de nanopartículas de Pt (átomo, dímero, trímero) sobre CNTs (5,5) es energéticamente favorable en todos los casos estudiados. El análisis geométrico muestra estructuras interesantes, que exhiben centros reactivos. La adsorción/disociación de agua fue investigada sistemáticamente sobre las zonas reactivas desde un punto de vista cinético y termodinámico. Nuestros resultados muestran que tanto el agua y las especies disociadas adsorbidas - H y OH - presentan afinidad por la nanoestructura de Pt frente al sustrato carbonoso. Además, se presentan estados de transición y energías de activación para la disociación del agua sobre las nanopartículas.

Referencias:

[1] Chi, D. H., Cuong, N. T., Tuan, N. A., Kim, Y.-T., Bao, H. T., Mitani, T., Ozaki, T. and Nagao, H. *Electronic structures of Pt clusters adsorbed on (5,5) single wall carbon nanotube*, Chem. Phys. Lett. **432**, 213 (2006).

Descripción multicéntrica de la simple ionización de moléculas orientadas de H_2 por impacto de electrones

• Emiliano Acebal,[1] Sebastian Otranto[1]

[1] *Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. L. N. Alem 1253, B8CPB - Bahía Blanca, Argentina.*

La ionización de átomos y moléculas por impacto de electrones ha sido materia de estudio durante décadas. Con la introducción de microscopios de reacción, a mediados de la década de 1990, se ha logrado un nivel de detalle experimental sin precedentes. Desde un punto de vista teórico, diversos modelos han logrado reproducir de manera precisa las estructuras experimentales de estos procesos de ionización para blancos atómicos simples. Sin embargo, la extensión de estos modelos a blancos moleculares complejos representa un desafío mayor y es objeto de continuo desarrollo.
En este contexto, en trabajos previos aplicamos el modelo "Continuum Distorted Wave-Eikonal Initial State" (CDW-EIS) para estudiar la simple ionización de la molécula de H_2O por impacto de electrones, estudiando este proceso a nivel plenamente diferencial [1]. En dicho trabajo, en el estado final el ion molecular fue considerado como un único centro de carga $Z = 1$. Este modelo condujo a un buen acuerdo con los datos experimentales obtenidos por Ren y colaboradores [2]. No obstante, una aproximación más sofisticada, que incorpore la anisotropía del ion residual en el estado final, es necesaria si uno desea estudiar blancos moleculares más complejos.
En este sentido, nuestro grupo extendió recientemente el modelo CDW-EIS para el caso de blancos multicéntricos, incluyendo la anisotropía del ion residual en el cálculo de la función de onda del estado final [3]. Bajo este formalismo, se realizaron cálculos de secciones eficaces plenamente diferenciales para estudiar la ionización simple de moléculas de H_2 con orientación específica.
En este trabajo, presentamos cálculos realizados para estudiar el proceso de colisión de electrones con moléculas de H_2 orientadas, para una energía de impacto de 54 eV. Tres modelos distintos son evaluados bajo el formalismo CDW-EIS. El primero considera al ion residual como un único centro de carga $Z = 1$ (1C), el segundo incorpora la naturaleza multicéntrica del blanco, pero despreciando la interacción de los electrones emitidos con los electrones restantes de la molécula (2C) y el tercer modelo considera explícita y completamente la anisotropía del ion residual en el estado final (MC). Se estudian diversas orientaciones moleculares con emisión en el plano perpendicular y para energías de emisión simétricas, siendo estos factores determinantes a la hora de poner a prueba los modelos teóricos. Los resultados obtenidos son contrastados con los datos experimentales de Ren y colaboradores y con las predicciones teóricas del método "Time Dependent Close Coupling" (TDCC) [4]. Del análisis realizado se desprende que el modelo MC es el que mejor reproduce las estructuras experimentales y, en particular, las posiciones de los máximos, a diferencia de los dos anteriores y del método TDCC.

Referencias:

[1] E. Acebal and S. Otranto, Phys. Rev. A **98**, 012703 (2018).
[2] X. Ren *et al.*, Phys. Rev. A **95**, 022701 (2017).
[3] E. Acebal and S. Otranto, Phys. Rev. A **102**, 042808 (2020).
[4] X. Ren *et al.*, Phys. Rev. Lett. **109**, 123202 (2012).

Generación de campos de fuerza para el modelado de sistemas soluto-solvente

• Gustavo Daniel Belletti,[1] Nancy Cabana,[1] Paola Quaino[1]

[1] *Instituto de Química Aplicada del Litoral (CONICET - UNL)*

Sin duda, los métodos experimentales modernos son una fuente invaluable de información para la caracterización de sistemas, pero en ocasiones la interpretación de los datos experimentales es ambigua. Por lo tanto, el papel de las simulaciones por computadora como los métodos de dinámica molecular (MD), son de gran ayuda. En este sentido, el método MD es una herramienta muy útil y conocida para el estudio de sistemas a nivel microscópico, ya que captura el comportamiento del sistema y proporciona información estática y dinámica para interpretar y caracterizar el sistema investigado. Con ella es posible predecir geometrías, propiedades físicas y químicas tales como energías de solvatación, coeficientes de difusión, entre otros. Una de las principales características de las simulaciones MD clásicas es el uso de campos de fuerza (FF) intra e intermoleculares como datos de entrada para describir las interacciones del sistema. La correcta descripción del sistema utilizando una simulación de MD depende en gran medida de la fidelidad de la selección del FF, por lo que el desarrollo de campos de fuerza es una disciplina en constante crecimiento.

En este contexto, se propone un protocolo fácil de implementar para el desarrollo de FF que se puede emplear para sistemas binarios [1]. Nuestra propuesta se basa principalmente en el estudio de las interacciones intermoleculares en un sistema soluto-solvente, que determinan las fuerzas sobre los átomos constituyentes. Como prototipo utilizamos un sistema O_2-dimetilsulfóxido (DMSO) para validar nuestro FF mediante la evaluación de las funciones de distribución radial, los coeficientes de difusión y la energía libre de solvatación. Nuestros resultados nos permiten concluir que nuestro FF es capaz de describir correctamente el sistema DMSO-O_2, en acuerdo con los resultados experimentales. A continuación, empleamos el protocolo para la obtención del FF de O_2 con otros solventes orgánicos de diferente naturaleza, como ser el 1,2-dimetoxietano (DME) y el acetonitrilo, demostrado también una buena performance. Es así que nuestro protocolo es una herramienta de gran utilidad que permite el desarrollo FF con aplicación para cualquier sistema soluto-solvente, donde los parámetros intermoleculares se calculan mediante un protocolo de parametrización FF simple y eficiente.

Referencias:

[1] G. D. Belletti, E. Schulte, E. Colombo, W. Schmickler, and P. Quaino, *Development of force fields for binary systems: Application to a dimethylsulfoxide (DMSO)-Oxygen mixture*, Chem. Phys. Lett. **735**, 136778 (2019).

Gradiente de campo eléctrico con el formalismo LRESC

• Juan José Aucar,[1] Alejandro Fabián Maldonado,[1] Juan I. Melo[2,3]

[1] *Instituto de Modelado e Innovación Tecnológica (CONICET - Universidad Nacional del Nordeste)*
[2] *CONICET*
[3] *Departamento de Fisica, FCEyN, UBA*

En este trabajo se estudian los efectos relativistas sobre el gradiente de campo eléctrico (EFG) con el formalismo Linear Response Elimination of the Small Component (LRESC), el cual permite obtener correcciones relativistas cuando se trabaja con sistemas que involucran atomos pesados. Se eligió el conjunto de moléculas XZY (Z = Zn, Cd, Hg ; X, Y = F, Cl, Br, I, At), que involucran hasta tres átomos pertenecientes a la 6ta fila de la Tabla Periódica. Los valores obtenidos se comparan con resultados relativistas de cuatro componentes a nivel Dirac-Hartree-Fock (4c-DHF). También se analiza las contribuciones provenientes de las componentes grandes y pequeñas de la función de onda de 4-componentes de manera separada, identificando así el origen de las correcciones descriptas por la metodología LRESC. Los resultados obtenidos muestran que, aún para los sistemas más pesados, los valores obtenidos con LRESC son próximos a los valores 4c-DHF, con diferencias máximas de 5%. Esto permite estudiar los mecanismos electrónicos responsables de los efectos relativistas en sistemas pesados basado en operadores no relativistas bien conocidos. Los mecanismos electrónicos subyacentes a los efectos relativistas aparecen con claridad al aplicar el formalismo LRESC al EFG y puede ser analizada cada contribución por separado o de manera global para cada conjunto de moléculas.

Cinética de las reacciones del radical CCl_2 con NO y con NO_2

• Nicolas Gomez,[1] Carlos Cobos,[2] Paula Badenes,[2] Eugenia Tucceri[2]

[1] *CEILAP (CITEDEF-CONICET) Villa Martelli, Buenos Aires, Argentina*
[2] *Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas, CONICET y Universidad Nacional de La Plata*

El radical CCl_2 es una especie altamente reactiva que puede obtenerse como producto de la combustión, incineración (de interés en el tratamiento de residuos) y fotólisis (de interés en la química atmosférica) de hidrocarburos clorados como por ejemplo $CHCl_3$ y CCl_4. Los estudios de la cinética del radical CCl_2 constituyen un área de activa investigación siendo escasos los reportes hallados en la literatura de la cinética de las reacciones con NO y con NO_2 [1, 2, 3]. En el presente trabajo estudiamos la cinética y los mecanismos por los cuales transcurren estas reacciones. Para eso, se calcularon las estructuras moleculares y frecuencias vibracionales de los reactivos, productos, estados de transición e intermediarios involucrados utilizando diversas formulaciones de la teoría del funcional de la densidad combinada con la base 6-311+G($3df$). La información termoquímica se obtuvo a partir de los métodos ab-initio de alto nivel CBS-QB3 y G4, caracterizando de esta manera las superficies de energía potencial de las reacciones mencionadas. Esta información se utilizó para calcular las constantes de velocidad en los límites de baja y alta presión, k_0 y k_∞ respectivamente. Los valores de k_0 se calcularon utilizando el formalismo de Troe [4], y los cálculos de k_∞ se realizaron mediante la teoría de canales estadísticamente adiabáticos combinada con cálculos de trayectorias clásicas SACM/CT [5,6]. Sobre la base de esta información se determinaron las constantes de velocidad de las reacciones con NO y con NO_2 en función de la presión y la temperatura, empleando el método de las curvas reducidas de falloff desarrollado por Troe [7].

Referencias:

[1] A.J. Eskola, I. Golonka, M.P. Rissanen, and R.S. Timonen, Chem. Phys. Lett. **460**, 401 (2008).
[2] A.A. Shestov, S.A. Kostina, E.V. Shafir, I.R. Slagle, and V.D. Knyazev, Chem. Phys. Lett. **381**, 766 (2003).
[3] Y. Liu, L. Pei, and Y. Chen, C. Chen, Chem. Phys. Lett., **385**, 314 (2004).
[4] J. Troe, J. Chem. Phys. **66**, 4758 (1977).
[5] A. I. Maergoiz, E.E. Nikitin, J. Troe, and V.G. Ushakov, J. Chem. Phys. **108**, 9987 (1998).
[6] A. I. Maergoiz, E.E. Nikitin, J. Troe, and V.G. Ushakov, J. Chem. Phys. **117**, 4201 (2002).
[7] J. Troe, V.G. and Ushakov, Z. Phys. Chem. **228**, 1 (2014).

Estudio del SWCNT (n=22,m=10) para almacenamiento de H2

• Eduardo Ariel Crespo,[1,2] Juan Manuel Gonzalez,[1] Mirtha Azucena Orozco,[1,3] Salvador Humberto Canzonieri,[1,3] Eduardo Marcial Bringa[4,5,6]

[1] *Universidad Tecnológica Nacional Facultad Regional Neuquén*
[2] *Departamento de Física, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional del Comahue.*
[3] *Instituto de Investigación en Tecnologías y Ciencias de la Ingeniería. IITCI CONICET UNCo*
[4] *Facultad de Ingeniería, Universidad de Mendoza*
[5] *CONICET*
[6] *Centro de Nanotecnología Aplicada, Facultad de Ciencias, Universidad Mayor, Santiago, 858075, Chile*

Los nanotubos de carbono de pared simple (Single Walled Carbon Nano Tube, SWCNT) tienen propiedades inusuales que son valiosas para la nanotecnología. En futuras aplicaciones podría empleárselos para almacenar y transportar H2 a altas presiones a escala nanométrica. La interacción del grafeno y en particular de los SWCNTs con moléculas de H2 puede abordarse por medio de simulaciones atomísticas que permiten obtener resultados comparables con datos experimentales, pero además brindar información no asequible por vía experimental. En particular la dinámica molecular (molecular dynamics, MD) es muy útil debido que permite que átomos y moléculas interactúen por un período de tiempo, permitiendo un análisis detallado de la termodinámica del sistema. En este trabajo, empleamos MD con el código libre LAMMPS, con potenciales AIREBO, para estudiar el comportamiento de un SWCNT (n=22, m=10) de diámetro 2nm con H2 en su interior, con condiciones periódicas a lo largo del eje del CNT. Se incluyen términos de orden de ligadura (bond-order) e interacciones de dihedros, pero no se incluyen interacciones de largo alcance. Se estudia la estabilidad y comportamiento del sistema para varias densidades de H2 (de 6 a 36 kg/m3) y temperaturas (de 200 a 1000K). Se calculan distribuciones de energías cinéticas atómicas, velocidades cuadráticas medias de las moléculas de H2, y términos del virial de la presión, para obtener la temperatura y presión del gas, comparando con una ecuación de estado analítica. De acuerdo a nuestros resultados es posible almacenar grandes cantidades de H dentro de un SWCNT sin generar adsorción química, lo cual dificultaría la extracción del hidrogeno.

Secciones eficaces de producción de rayos x por impacto de electrones de 2,5 a 28 keV para capas M de osmio

• Alfredo Aguilar,[1] Jorge Trincavelli,[1,2] Alejo Carreras,[1,2] Gustavo Castellano[1,2]

[1] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*
[2] *Instituto de Física Enrique Gaviola, IFEG-CONICET, Argentina*

En este trabajo se determinaron experimentalmente secciones eficaces de producción de rayos x para las capas M de osmio, por impacto de electrones. Para ello se midieron espectros de emisión de rayos x inducidos por haces de electrones de energías entre 2,5 y 28 keV en un blanco grueso de osmio, en un microscopio electrónico de barrido con cañón por emisión de campo Zeiss-Σigma que cuenta con un detector dispersivo en energías. Se procesaron los espectros medidos mediante un programa de análisis espectral desarrollado previamente, que se basa en el ajuste del espectro experimental a través de una rutina de optimización de parámetros atómicos y experimentales, involucrados en una función analítica propuesta para describirlo, sobre la base de funciones de distribución de profundidad de ionización. Los valores de secciones eficaces de producción de rayos x se obtuvieron como resultado del refinamiento de los correspondientes parámetros en el proceso de ajuste espectral, siguiendo un algoritmo iterativo de optimización. Estos resultados se comparan con los escasos datos disponibles en la literatura.

Determinación experimental de secciones eficaces de producción de rayos x por impacto de electrones para capas M de iridio

• Mayco Décima,[1] Jorge Trincavelli,[1,2] Gustavo Castellano,[1,2] Alejo Carreras[1,2]

[1] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*
[2] *Instituto de Física Enrique Gaviola, IFEG-CONICET, Argentina*

Se determinaron experimentalmente secciones eficaces de producción de rayos x para capas M de iridio, por impacto de electrones de energías entre 2,5 y 28 keV. Para este propósito se irradió un blanco grueso de iridio puro con un haz de electrones generado en un microscopio electrónico de barrido con cañón por emisión de campo Zeiss-Σigma, variando la energía incidente, y se midieron los espectros emitidos con un espectrómetro dispersivo en energías, monitoreando la corriente del haz. Los espectros así adquiridos fueron procesados mediante un software de análisis espectral previamente desarrollado, basado en una rutina de optimización de parámetros atómicos y experimentales, que involucra una función analítica para describir el espectro experimental. Se determinaron entonces los valores de las secciones eficaces de producción de rayos x como resultado de dicho procesamiento espectral, luego de un cuidadoso proceso iterativo de optimización. Los resultados obtenidos se comparan con los escasos datos disponibles en la literatura.

Correcciones relativistas y de QED en acoplamiento indirecto espín-espín de compuestos X_2^{2+} y X_3^{2+} (X = Zn, Cd, Hg)

• Mariano Colombo Jofré,[1] Karol Kozioł,[2] Gustavo Aucar[1]

[1] *Instituto de Modelado e Innovación Tecnológica, CONICET-UN del Noreste*
[2] *Narodowe Centrum Badań Jadrowych*

La espectroscopía de resonancia magnética nuclear (RMN) es una poderosa herramienta teórico/experimental utilizada, entre muchas otras aplicaciones, para identificar compuestos químicos y predecir sus estructuras moleculares. El cálculo preciso de sus dos parámetros espectroscópicos más relevantes, el apantallamiento nuclear, σ, y la constante de acoplamiento indirecto espín-espín, J, es un gran desafío que requiere considerar varios efectos intra e intermoleculares. La correlación electrónica y los efectos relativistas, en compuestos que contienen átomos pesados, representan las correcciones más importantes que deben incluirse para obtener una reproducción teórica precisa de dichos parámetros. Para moléculas que contienen átomos de la 5ta o 6ta fila de la Tabla Periódica, los efectos relativistas pueden alcanzar valores equiparables a los valores obtenidos con la teoría no relativista.
Sin embargo, durante los últimos años, se hicieron pocos intentos por estimar cuantitativamente la influencia de los efectos de la electrodinámica cuántica (QED) sobre los dos parámetros espectroscópicos, σ y J. Se han publicado correcciones de QED sobre el espectro de estructura hiperfina para iones de tipo hidrógeno [1] y de tipo litio [2]. Para los átomos neutros, solo hay unos pocos trabajos que se centren en las correcciones de QED sobre la estructura hiperfina. En el caso de los metales alcalinos, existen datos para los estados s, $p_{1/2}$ y $p_{3/2}$ [3].
En el presente trabajo abordamos la estimación del orden de magnitud de los efectos de QED sobre el acoplamiento indirecto espín-espín en moléculas de la forma X_2^{2+} y X_3^{2+}, con elementos del grupo 12 de la tabla periódica X = Zn, Cd, Hg, utilizando el formalismo de propagadores de polarización y siguiendo un esquema similar al empleado algunos años atrás para la estimación de los mismos efectos sobre el apantallamiento nuclear σ [4]. Encontramos que los efectos de QED son cercanos al 1% del valor total de J, lo que sugiere que su valor es muy significativo para esta propiedad y que dichos efectos deben ser incluídos en cálculos de gran precisión. Asimismo, analizamos el origen electrónico de los efectos relativistas y de correlación electrónica sobre dicho parámetro espectroscópico.

Referencias:

[1] Sapirstein, J., Cheng, K. T., and Chen, M. H. *Potential independence of the solution to the relativistic many-body problem and the role of negative-energy states in helium like ions*, Phys. Rev. A **59**, 259 (1999); Sunnergren, P., Persson, H., Salomonson, S., Schneider, S. M., Lindgren, I., and Soff, G. *Radiative corrections to the hyperfine-structure splitting of hydrogenlike systems*, Phys. Rev. A **58**, 1055 (1998); Karshenboim, S. G., and Ivanov, V. G. *Hyperfine structure in hydrogen and helium ion*, Phys. Lett. B **524**, 259 (2002).
[2] Boucard, S., and Indelicato, P. *Relativistic many-body and QED effects on the hyperfine structure of lithium-like ions*, Eur. Phys. J. D **8**, 59 (2000).
[3] Sapirstein, J., and Cheng, K. T. *Calculation of radiative corrections to hyperfine splittings in the neutral alkali metals*, Phys. Rev. A **67**, 022512 (2003); Sapirstein, J., and Cheng, K. T. *Calculation of radiative corrections to hyperfine splitting in $p_{1/2}$ states*, Phys. Rev. A **74**, 042513 (2006); Sapirstein, J., and Cheng, K. T. *Calculation of radiative corrections to hyperfine splitting in $p_{3/2}$ states*. Phys. Rev. A **78**, 022515 (2008).
[4] Kozioł, K., Aucar, I. A. and Aucar, G. A. *Relativistic and QED effects on NMR magnetic shielding constant of neutral and ionized atoms and diatomic molecules*, J. Chem. Phys. **148**, 134101 (2019).

Estudio relativista de efectos de no conservación de paridad en tensores de spin-rotación

• Ignacio Agustín Aucar,[1,2] Anastasia Borschevsky[3]

[1] *Dpto. de Física - Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura - Universidad Nacional del Nordeste*
[2] *Instituto de Modelado e Innovación Tecnológica (CONICET - Universidad Nacional del Nordeste)*
[3] *Faculty of Science and Engineering - Van Swinderen Institute for Particle Physics and Gravity - University of Groningen*

Presentamos un estudio relativista de cuatro componentes de efectos de violación de paridad debido a fuerzas electrodébiles en tensores de *spin*-rotación. El formalismo teórico propuesto se basa en la teoría de propagadores de polarización relativistas, empleando un Hamiltoniano de Dirac-Coulomb. Los cálculos realizados permiten planificar e intepretar posibles futuros experimentos orientados a brindar una prueba estricta del Modelo Estándar a partir de la observación de efectos de violación de paridad en espectroscopía rotacional. Una aplicación exploratoria de la teoría desarrollada a un conjunto de moléculas quirales permite observar la sustancial importancia de la inclusión de efectos relativistas para describir estas contribuciones. En particular, se observa que los efectos *spin*-free y *spin*-órbita poseen signos opuestos para algunas de las estructuras moleculares, y que los efectos *spin*-órbita son absolutamente dominantes en el caso de los núcleos más pesados. Los cálculos de cuatro componentes de constantes de *spin*-rotación isotrópicas incluyendo efectos de interacción electrodébil permiten estimar diferencias de frecuencias de hasta 4,2 mHz entre enantiómeros de H_2Po_2, mientras que los cálculos no relativistas en el mismo sistema indican diferencias que se reducen a apenas 0,1 mHz.

Explotando el carácter local de la correlación electrónica en el marco de la resolución de la ecuación de Schrödinger contraída antihermítica

• Elías Ríos,[1] E. M. Honoré,[2] Diego Ricardo Alcoba,[3,4] Gustavo Ernesto Massaccesi,[2] Alicia Torre,[5] Luis Lain,[5] Ofelia Beatriz Oña[1]

[1] *Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas, Universidad Nacional de la Plata, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Diag. 113 y 64 (S/N), Sucursal 4, CC 16, 1900 La Plata, Argentina.*
[2] *Departamento de Ciencias Exactas, Ciclo Básico Común, Universidad de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, 1428 Buenos Aires, Argentina.*
[3] *Instituto de Física de Buenos Aires, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Ciudad Universitaria, 148 Buenos Aires, Argentina.*
[4] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, 148 Buenos Aires, Argentina.*
[5] *Departamento de Química Física, Facultad de Ciencia y Tecnología, Universidad del País Vasco. Apdo. 644, E-48080 Bilbao, España.*

En los últimos años se ha dedicado un considerable esfuerzo a la determinación de matrices de densidad reducida de dos cuerpos de sistemas N-electrónicos en forma directa, evitando el cálculo previo de las correspondientes funciones de onda. Uno de los métodos recientemente propuestos se basa en la resolución de la porción antihermítica de la ecuación de Schrödinger contraída, (o ecuación hipervirial de Liouville-von Neumann contraída) [1,2]. En este trabajo se presentan una serie de análisis teórico-prácticos centrados en el estudio de las consecuencias del carácter local de la correlación electrónica [3] de sistemas N-electrónicos que, dentro de este esquema teórico, afectan a la estructura y el álgebra de las porciones cumulantes de las matrices de densidad reducida. Estos estudios permiten identificar la estrategia más conveniente para explotar la localización espacial de la correlación electrónica dentro de este método y, por tanto, mejorar en forma notoria la eficiencia computacional del mismo al tratar sistemas de tamaño medio a grande. La implementación de la formulación local resultante permite investigar la precisión alcanzada, así como la reducción del costo y requerimientos computacionales. Nuestra propuesta ha sido aplicada, como ejemplo de prueba, al estudio de la correlación electrónica presente en cadenas lineales compuestas por átomos de hidrógeno bajo geometrías correspondientes a comportamientos del tipo molecular (alta dimerización) y metálico (baja dimerización), entre otras, obteniendo resultados muy satisfactorios.

Referencias:

[1] D.A. Mazziotti, Phys. Rev. Lett. **97**, 143002 (2006).
[2] D.R. Alcoba *et al.*, Int. J. Quantum Chem. **109**, 3178 (2009).
[3] W. Kohn, Phys. Rev. Lett. **76**, 3168 (1996).

Influencia de defectos superficiales en la difracción de átomos rápidos

• Leandro Frisco,[1] María Silvia Gravielle[1]

[1] *Instituto de Astronomía y Física del Espacio, CONICET-UBA*

La difracción de átomos rápidos por incidencia rasante (GIFAD por sus siglas en inglés) es una técnica de análisis superficial excepcionalmente sensible a las características electrónicas y morfológicas de la última capa atómica [1]. Su aplicación requiere del uso de blancos cristalinos con un ordenamiento periódico, por lo cual la limpieza y preparación de la superficie resultan esenciales en los experimentos de GIFAD. Sin embargo, aún bajo las mejores condiciones de preparación los cristales reales presentan defectos, los cuales podrían afectar los patrones de interferencia.
En este trabajo estudiamos la influencia de las terrazas superficiales, habitualmente presentes en los cristales reales, sobre los patrones de GIFAD producidos por el impacto rasante de átomos de He sobre una superficie de LiF. Para ello utilizamos la aproximación Surface Initial Value Representation [2], junto con un potencial aditivo de a pares [3]. Dado que el requerimiento de periodicidad es especialmente crucial a lo largo del canal de incidencia, consideramos la presencia de escalones ubicados perpendicularmente al eje axial y de altura igual a la distancia entre capas. Para un cristal perfecto, la conservación de la energía (asociada a la dispersión elástica) impone que los máximos de interferencia se distribuyan sobre un anillo, denominado círculo de Laue. Pero la presencia de terrazas en el cristal introduce además un fondo difuso, el cual se ubica por encima o por debajo del círculo de Laue para escalones salientes o entrantes, respectivamente, con respecto a la superficie observada por el proyectil en la trayectoria de entrada. Dicho fondo es particularmente extenso en el primer caso, para el que las distribuciones de GIFAD presentan además estructuras de interferencia adicionales de menor intensidad.

Referencias:

[1] M. Debiossac *et al.*, Phys. Chem. Chem. Phys. **23**, 7615 (2021).
[2] L. Frisco *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter **30**, 405001 (2018).
[3] J.E. Miraglia and M.S. Gravielle, Phys. Rev. A **95**, 022710 (2017).

Grafeno amino-carboxi-funcionalizado: estudio de la adsorción del fármaco mesalazina

• Gabriel Román,[1] Andrés Díaz Compañy,[1,2] Sandra Ulacco,[3] Sandra Simonetti[1,3]

[1] *Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. L. N. Alem 1253, B8CPB - Bahía Blanca, Argentina.*
[2] *Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires, Calle 526 entre 0 y , 900 La Plata, Argentina*
[3] *Universidad Tecnológica Nacional (UTN), 11 de Abril 461, B8000LMI - Bahía Blanca, Argentina.*

El diseño de nuevos sistemas de administración de medicamentos es un desafío a superar con el objetivo de encontrar estrategias terapéuticas que disminuyan la frecuencia de administración y aumenten la eficiencia de los medicamentos. En este trabajo proponemos diferentes superficies de grafeno para modificar la administración del fármaco mesalazina. La adsorción en grafeno prístino y en grafeno funcionalizado con los grupos amino y amino-carboxilo se analiza a nivel de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT). El anillo aromático de la mesalazina se localiza coplanar a la superficie del grafeno prístino y es atraído débilmente por interacciones del tipo π-π (-0.53 eV). Sin embargo, la energía de adsorción es casi inestable (-0.17 eV) cuando la molécula se adsorbe en el grafeno funcionalizado con el grupo amino, ya que el factor de efecto estérico impide la interacción π -π entre la molécula y los anillos superficiales. Por el contrario, se favorece la energía de adsorción de la mesalazina con la superficie de grafeno funcionalizada simultáneamente con los grupos amino y carboxílico (-1.09 eV). Las interacciones absorbato-sustrato son promovidas por la formación de enlaces hidrógeno entre la molécula y los grupos funcionales de la superficie, que aumentan la estabilidad del sistema. A pH básico, la energía de la mesalazina desprotonada es la más estable (-1.60 eV). Se observa que la bi-funcionalización disminuye el ancho entre las bandas de conducción y de valencia, facilitando las interacciones entre el fármaco y la superficie. La mejora en la adsorción se pueden atribuir además a la modificación de los orbitales HOMO-LUMO de la mesalazina a pH básico.

Descripción clásica de procesos de ionización en átomos de carbono por impacto de electrones

• Nicolás Bachi,[1] Sebastian Otranto,[1] Károly Tokési[2]

[1] *Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. L. N. Alem 253, B8000CPB - Bahía Blanca, Argentina.*
[2] *Institute for Nuclear Research, 406 Debrecen Bem tér 18/c, Hungary*

En el presente trabajo se estudia la ionización de átomos de carbono por impacto de electrones en un rango de energía comprendido entre los 20 y 1000 eV. Para ello se utiliza el método de trayectorias clásicas Monte Carlo (CTMC). Las contribuciones de los orbitales 2s y 2p a las secciones totales de ionización se comparan con datos experimentales. Estos resultados sugieren que un tratamiento clásico es adecuado para energías de impacto por encima de los 100 eV, sin embargo, presentan deficiencias a la hora de calcular la emisión electrónica para el régimen de baja energía. Las causas de estas deficiencias son evaluadas y se propone un método para sortearlas.

Entrelazamiento cuántico dependiente e independiente del espín en H_2O_2

• Daniel Fernando Esteban Bajac,[1] Gustavo Adolfo Aucar[1]

[1] *Dpto. de Física - Facultad de ciencias exactas y Naturales y Agrimensura - UNNE amp; IMIT - CONICET*

Trabajando con una matriz de densidad que está bien definida dentro del formalismo del Propagador de Polarización, junto con la teoría de la información, se encontró que la regla de Karplus, un fenómeno empírico bien conocido, tiene su origen en el entrelazamiento entre dos pares de excitaciones virtuales de orbitales moleculares localizados (OML) utilizando el término dependiente del espín del Propagador Principal [1]. En este trabajo se amplía lo conocido [2] y se analiza el entrelazamiento cuántico que surge de utilizar los términos independientes del espín del Propagador Principal, utilizando orbitales localizados de Pipek-Mezey.

Referencias:

[1] L. Millán, C. Giribet and G. Aucar. J. Chem. Phys. **153**, 221101 (2020). DOI
[2] L. Millán, C. Giribet and G. Aucar. Phys. Chem. Chem. Phys. **20**, 24832 (2018). DOI

Acoplamiento indirecto entre espines nucleares de hidrógenos: efectos del solvente y el apilamiento de pares de bases en fragmentos de ADN

• Fernando Martínez,[1,2] Gustavo Aucar[1,2]

[1] *Instituto de Modelado e Innovación Tecnológica, CONICET-UN del Noreste*
[2] *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura - Universidad Nacional del Nordeste*

Entre las interacciones no covalentes más importantes, se encuentran las interacciones de stacking o apilamiento de anillos aromáticos, ya que afectan la estructura tridimensional, especificidad y estabilidad de macromoléculas tales como proteínas, ácidos nucleicos, etc. A nivel teórico se han logrado enormes progresos en el estudio de las energías y los procesos electrónicos involucrados con gran precisión.[1-2] Sin embargo, los estudios teóricos que ayuden a entender la influencia de éstas sobre los parámetros espectroscópicos de la RMN son aún muy escasos. Y mucho más aún si la atención se centra en sistemas con un tamaño apreciable, como el que poseen los sistemas biológicos. [3] Otro aspecto que surge es también la presencia del solvente y su influencia en los cálculos teóricos de propiedades magnéticas.
El mecanismo de transmisión Through-Space de acoplamientos indirectos se ha propuesto siempre que se han encontrado valores apreciables de J para núcleos separados por muchos enlaces aunque próximos espacialmente. Por lo general, se ha observado este mecanismo entre átomos con pares de electrones desapareados superpuestos, particularmente entre F-F; pero también se ha encontrado en F-C, F-N, F-H, P-P y C-P, así como, más raramente, entre núcleos metálicos. También se lo ha detectado entre núcleos de hidrógeno formalmente separados por 18 enlaces covalentes en moléculas helicoidales modelo, teniendo la capacidad de proveer información estructural crucial acerca de la conformación molecular en solución. [4]
En el presente trabajo se expondrán de manera sintética resultados preliminares de cálculos teóricos (a nivel DFT) de acoplamientos indirectos J entre núcleos de hidrógeno en sistemas conformados por pares de bases del ADN, los cuales se hallan apilados formando fragmentos de distintos tamaños y de secuencias variables. Para lograr una mejor descripción de los sistemas reales, se han tenido en cuenta los efectos producidos por las moléculas de solvente (agua), modelado tanto implícita como explícitamente.

Referencias:

[1] J. Rezác and P. Hobza, Chem.-A Eur. J. **13**, 2983 (2007).
[2] J. Poater, M. Swart, F. M. Bickelhaupt and C. Fonseca Guerra, Org. Biomol. Chem. **12**, 4691 (2014).
[3] F. Martínez and G. Aucar, Phys. Chem. Chem. Phys. **19**, 27817 (2017).
[4] M. Dracínský, M. Buchta, M. Budesínský, J. Vacek-Chocholousová, I. G. Stará, I. Starý, and O. L. Malkina. Chem. Sci. **9**, 7437 (2018).

Análisis del contenido de P y Ca en tejidos cancerígenos por micro-XRF

• Daniela Riego,[1,2] Constanza Bencharski,[1,2] Gisele Evangelina Falchini,[1,2] María Eugenia Pasqualini,[1,2] Elio Andrés Soria,[1,2] Roberto Daniel Perez[1,2]

[1] *Facultad de Ciencias Médicas, Universidad Nacional de Córdoba*
[2] *Instituto de Física Enrique Gaviola (CONICET-UNC)*

En el presente trabajo se ha implementado el Microanálisis por Fluorescencia de Rayos X (micro-XRF) para el estudio de tejidos neoplásicos. Esta técnica permite un análisis multielemental simultáneo no destructivo, simplificando la tarea laboriosa que implica el análisis elemental tradicional por histoquímica. En particular la micro-XRF permite el monitoreo de calcio y fósforo cuya presencia está asociada a microcalcificaciones y al metabolismo tumoral [1]. El fósforo muestra un incremento significativo en tumores malignos por lo que recientemente se lo ha empezado a emplear como posible biomarcador en modelos de prognosis del cáncer de mama. Estudios preliminares llevados a cabo por el grupo de investigación de la postulante han mostrado la viabilidad de la metodología propuesta particularmente aplicada en la determinación de fósforo [2]. Las ventajas de la micro-XRF en el estudio del contenido de metales en tejidos biológicos fueron aprovechadas para el seguimiento durante 30 días de calcio y fósforo en neoplasias de un modelo murino de cáncer mamario. La micro-XRF fue implementada con luz blanca eficazmente focalizada en un área de decenas de micrones. Mediante una precisa cuantificación del fósforo y calcio se ha podido inferir la variedad del cristal calcificado posiblemente presente en las neoplásias, caracterización necesaria para distinguir lesiones malignas y benignas. Se utilizó además el contenido del fósforo como indicador de la actividad y progresión tumoral. Para lograr una buena resolución espacial combinada con una precisa cuantificación, las tareas experimentales y tratamiento de datos fueron asistidas mediante la simulación de transporte de radiaciones por técnicas Monte Carlo recurriendo al programa XMI-MSIM de código abierto [3]. El conocimiento preciso del espectro de excitación se obtuvo aplicando un método anteriormente desarrollado por el grupo de investigación del presente proyecto que introduce mejoras en el tratamiento de los datos medidos [4].

Referencias:

[1] Falchini, G.E., Poletti, M.E., Soria, E., Pasqualini, M., and Perez, R.D., *Analysis of phosphorous content in cancer tissue by synchrotron micro-XRF*, Radiat. Phys. Chem. **179**, 109157 (2021).
[2] Perez, R.D., Falchini, G.E., L., Poletti, M.E., Leani, J.J., Perez, C.A., and Sánchez, H.J., *Study of anti-tumorigenic actions of Omega-3 fatty acid in a murine mammary gland adenocarcinoma by micro-XRF analysis*, Technical Report LNLS proyecto 20170158 (2018).
[3] Schoonjans, T., Solé, V. A., Vincze, L., Sanchez del Rio, M., Appel, K., and Ferrero, C., *A general Monte Carlo simulation of energy-dispersive X-ray fluorescence spectrometers — Part 6. Quantification through iterative simulations*, Spectrochim. Acta B **82**, 36 (2013).
[4] Perez, R.D., Sosa, C., Sbarato, V., Leani, J., and Sánchez, H., *Determination of x-ray excitation spectra in micro-XRF spectrometry with capillary optics*, Spectrochim. Acta B **117**, 23 (2016).

Aplicación de la micro-XRF en el estudio del efecto una dieta rica en ácidos grasos poliinsaturados sobre tumores mamarios

• Constanza Bencharski,[1,2] Daniela Riego,[1,2] Gisele Evangelina Falchini,[1,2] María Eugenia Pasqualini,[1,2] Elio Andrés Soria,[1,2] Roberto Daniel Perez[1,2]

[1] *Facultad de Ciencias Médicas, Universidad Nacional de Córdoba*
[2] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*

El cáncer de mama representa la principal causa de muerte por cáncer entre las mujeres de los países desarrollados y en la mayoría de los países en vías de desarrollo. En Argentina, se registran 17,8 muertes por 100.000 mujeres en el año 2016 (Ballesteros y Abriata, 2018). Es por eso que la prevención y diagnóstico temprano es fundamental para bajar los índices de mortalidad. Un factor importante que interviene en el proceso de carcinogénesis es el tipo de alimentación. Existe una gran variedad de alimentos que tienen comprobada acción antitumoral. Dentro de este grupo destacan alimentos naturales como frutas, verduras y determinadas hierbas aromáticas. Estos alimentos se destacan por poseer compuestos bioactivos que alteran el metabolismo del tejido tumoral limitando o impidiendo su crecimiento. Recientemente han recibido particular atención los alimentos naturales que aportan ácidos grasos poliinsaturados (PUFAs por su sigla en inglés) (Saini y Keum, 2018). Diversas investigaciones abordaron el rol de los PUFAs en la inflamación, proliferación de células, angiogénesis y apoptosis en el cáncer mamario. Desde el punto de vista inflamatorio, se considera al ω-3 beneficioso frente al cáncer por ser antiinflamatorio (Saini y Keum, 2018). En cambio, fuentes de ω-6 presentan un comportamiento pro inflamatorio y trombótico (Gleissman et al., 2010).
Este trabajo se desarrolló una metodología para la determinación de la concentración local de calcio, zinc, hierro, azufre, manganeso y cobre en adenocarcinomas murinos por Micro Fluorescencia de Rayos X (Micro-XRF) para estudiar el efecto de dietas de PUFAs ω-3 y ω-6. Se utilizaron 40 ratones albinos BALB/C implantados con un adenocarcinoma de los cuales 20 fueron alimentados con una dieta normal (grupo control), 10 con una dieta rica en PUFAs ω-3 (grupo ω3) y 10 con una dieta rica en PUFAs ω-6 (grupo ω6). Luego de 30 días lo ratones fueron sacrificados, se extrajeron los tumores y se conservaron en una solución acuosa de formol al 5% v/v. Para realizar el análisis por micro-XRF las muestras se cortaron a 30 μm utilizando un micrótomo y se pegaron sobre una película Kapton de 8 μm (Chemplex Inc.) con una solución acuosa de PVA de alta pureza (Sigma-Aldrich). El mapeo por XRF se realizó excitando pixel por pixel la muestra con radiación de sincrotrón en áreas específicas previamente seleccionadas con ayuda del análisis histológico. El seguimiento de los metales por micro-XRF mostró que el Ca, Fe, Cu y Zn presentan variaciones específicas para cada tipo de tejido (glandular, adiposo y neoplásico) y entre los grupo de estudio (control, ω3 y ω6). Además, se utilizó Análisis bidimensional por Componente Principales (PCA) para estudiar las correlaciones espaciales de los elementos en los tres grupos de muestras. Se observó una fuerte correlación entre Ca y Zn y un aumento de estos elementos en regiones con alto metabolismo celular para el grupo ω3.

Referencias:

[1]Ballesteros I, and Abriata MG. Boletín vigilancia epidemiológica: Análisis de Situación de Salud por Cáncer. Argentina: Instituto Nacional del Cáncer; 50 p. (2018).
[2]Saini RK, Keum YS. *Omega-3 and omega-6 polyunsaturated fatty acids: Dietary sources, metabolism, and significance — A review*, Life Sci. **203**, 255 (2018). DOI
[3]Gleissman H, Johnsen JI, and Kogner P. *Omega-3 fatty acids in cancer, the protectors of good and the killers of evil?*, Exp Cell Res. **316**, 1365 (2010). DOI

Estudios sobre la eficacia de algunas condiciones de N-representabilidad en la determinación variacional de matrices de densidad reducida de dos partículas en el espacio de configuraciones doblemente ocupadas

• Dario Corvalan,[1] Elías Ríos,[2] Ofelia B. Oña,[2] Diego R. Alcoba,[3,4] Gustavo E. Massaccesi,[1] Alicia Torre,[5] Luis Lain,[5] Pablo Capuzzi[3,4]

[1] *Departamento de Ciencias Exactas, Ciclo Básico Común, Universidad de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, 1428 Buenos Aires, Argentina.*
[2] *Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas, Universidad Nacional de la Plata, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Diag. 113 y 64 (S/N), Sucursal 4, CC 16, 1900 La Plata, Argentina.*
[3] *Instituto de Física de Buenos Aires, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Ciudad Universitaria, 1428 Buenos Aires, Argentina.*
[4] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, 1428 Buenos Aires, Argentina.*
[5] *Departamento de Química Física, Facultad de Ciencia y Tecnología, Universidad del País Vasco. Apdo. 644, E-48080 Bilbao, España.*

Entre los tratamientos desarrollados en las últimas décadas para aproximar directamente las matrices de densidad de dos partículas correspondientes a un sistema N-electrónico, los métodos variacionales ocupan un lugar destacado. Este tipo de procedimientos requiere, sin embargo, la introducción de determinadas condiciones en los algoritmos de minimización, de manera que se garantice que las matrices calculadas correspondan únicamente a funciones de onda N-electrónicas. En trabajos anteriores [1-5], presentamos un nuevo método variacional que impone las condiciones denominadas de 2-, 3-, y 4-positividad, con el que obtuvimos una descripción satisfactoria, tanto de estados fundamentales como excitados, dentro del espacio de interacción de configuraciones doblemente ocupadas. En este trabajo, ampliando la propuesta planteada en [6], consideramos una clase sencilla de Hamiltonianos derivados de relaciones de dispersión, para los que una función de onda exacta del estado fundamental puede escribirse como un único determinante de Slater. No obstante, hemos obtenido que el mismo enfoque variacional da un resultado drásticamente no N-representable. Tal resultado muestra la necesidad de imponer condiciones de representabilidad más fuertes que las mencionadas, sobre las que se deberá investigar.

Referencias:

[1] W. Poelmans, M. Van Raemdonck, B. Verstichel, S. De Baerdemacker, A. Torre, L. Lain, G.E. Massaccesi, D.R. Alcoba, P. Bultinck, and D. Van Neck, J. Chem. Theory Comput. **11**, 4064 (2015).
[2] A. Rubio-García, D.R. Alcoba, P. Capuzzi, and J. Dukelsky, J. Chem. Theory Comput. **14**, 4183 (2018).
[3] D.R. Alcoba, P. Capuzzi, A. Rubio-García, J. Dukelsky, G.E. Massaccesi, O.B. Oña, A. Torre, and L. Lain, J. Chem. Phys. **149**, 194105 (2018).
[4] G.E. Massaccesi, A. Rubio-García, P. Capuzzi, E. Ríos, O.B. Oña, J. Dukelsky, L. Lain, A. Torre, and D.R. Alcoba, J. Stat. Mech. 013110 (2021).
[5] D.R. Alcoba, O.B. Oña, L. Lain, A. Torre, P. Capuzzi, G.E. Massaccesi, E. Ríos, A. Rubio-García, and J. Dukelsky, J. Chem. Phys. **154**, 224104 (2021).
[6] M. Nakata, B.J. Braams, M. Fukuda, J.K. Percus, M. Yamashita, and Z. Zhao, J. Chem. Phys. **125**, 244109 (2006).

Ensayos de tracción en nanocables de Pd para la detección de H

• Eduardo Ariel Crespo,[1] Juan Manuel Gonzalez,[1] Margarita María Ruda,[2] Susana Beatriz Ramos,[3] Eduardo Marcial Bringa[4,5,6]

[1] *Universidad Tecnológica Nacional Facultad Regional Neuquén*
[2] *Centro Atomico Bariloche - Comisión Nacional de Energía Atómica*
[3] *Instituto de Investigación y Desarrollo en Ingeniería de Procesos, Biotecnología y Energías Alternativas - CONICET - UNCo*
[4] *CONICET*
[5] *Centro de Nanotecnología Aplicada, Facultad de Ciencias, Universidad Mayor, Santiago, 858075, Chile*
[6] *Facultad de Ingeniería, Universidad de Mendoza*

Los nanocables de Pd (NCs) resultan de gran interés en aplicaciones nanotecnológicas como por ejemplo en sensores de pequeñas cantidades de H a muy bajas presiones. Se trata de estructuras delgadas de Pd que pueden considerarse cuasi-unidimensionales puesto que dos de sus dimensiones resultan nanométricas. Para utilizarlos en nanotecnología resulta necesario conocer sus propiedades mecánicas bajo distintas condiciones. En este trabajo se simulan, empleando dinámica molecular, con el software LAMMPS y con potenciales del tipo átomo embebido (EAM), ensayos de tracción a 300K en NCs monocristalinos de Pd, con distinto contenido de H. Se estudian diámetros de 2 a 7 nm y dos orientaciones cristalinas axiales [1,1,1] y [0,0,1]. Se analiza la segregación del H dentro de los NCs. Se determinan el módulo de Young y punto de fluencia de los mismos. Se estudia la aparición y evolución de los defectos producto de la deformación, que incluyen dislocaciones, fallas de apilamiento, y maclas, y la manera en que el H modifica el tipo de deformación. Para el rango de contenido de H estudiado no se observan transiciones de fase y tampoco amorfización. La presencia de defectos puede incrementar la capacidad de detección de H de los NCs.

Propiedades Electrónicas en Complejos Moleculares con Actínidos

• Smrimanta Pakhira,[1] Andy D Zapata-Escobar,[2] Joaquin Barroso,[3] Gustavo A Aucar,[2] Jose Mendoza-Cortes[4]

[1] *Department of Physics, Department of Metallurgy Engineering and Materials Science (MEMS), Centre for Advanced Electronics (CAE), Indian Institute of Technology Indore, Simrol, Khandwa Road, Indore, 453552, Madhya Pradesh (M.P.), India.*
[2] *Dpto. de Física - Facultad de ciencias exactas y Naturales y Agrimensura - UNNE amp; IMIT - CONICET*
[3] *Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Circuito Exterior SN, Ciudad Universitaria, Coyoacán CP 04510 Ciudad de México, México*
[4] *Department of Chemical Engineering Materials Science, Michigan State University, East Lansing, Michigan 882, USA.*

El conocimiento de las características fundamentales de compuestos que contienen tierras raras y actínidos es de gran interés actual, particularmente debido a la necesidad de tratar desechos nucleares.[1] En el campo experimental, el desarrollo de la química de los actínidos se ve obstaculizado por la falta de isótopos disponibles, la necesidad de instalaciones de investigación especializadas y su inestabilidad nuclear (radiactividad intrínseca). Por otro lado, los actínidos se encuentran en la frontera de los métodos teóricos actuales debido a la necesidad de considerar efectos relativistas con métodos de cuatro-componentes (Ecuación de Dirac) o algunas de sus aproximaciones.[2] En este trabajo presentaremos el estudio de las propiedades electrónicas de compuestos que contienen actínidos con métodos que incluyen los efectos relativistas al nivel más preciso de aproximación actual. Estudiamos la geometría, la estructura electrónica y el origen atómico de las interacciones de los átomos de Plutonio (Pu), Americio (Am), Californio (Cf) y Berkelio (Bk) con el ligando orgánico activo redox considerado como un sistema modelo; dioxofenoxazina (DOPO = 2,4,6,8-tetra-terc-butil-1-oxo-1H-fenoxazin-9-olato). Para estudiar su estructura electrónica se realizaron cálculos relativistas y no relativistas de última generación en diferentes niveles de teoría: a) la aproximación regular de orden cero (ZORA) con orbitales moleculares obtenidos por DFT,[3] b) método de cuatro componentes (DHF)[4] y c) método no relativistas con el Hamiltoniano de Lévy-Leblond (LL)[5]. Mostramos que DFT-ZORA es una aproximación adecuada para predecir e investigar sobre la geometría estructural y las propiedades electrónicas de los actínidos que son difíciles de sintetizar o caracterizar. También mostramos que al nivel más alto de teoría, el DHF de 4 componentes, se obtienen resultados más cercanos a los experimentos. Finalmente, mostramos por primera vez que la participación de los orbitales atómicos 5f (AO) de los Actínidos en los orbitales moleculares de frontera (MO) se ven fuertemente afectados por los efectos relativistas, además de la energía relativa. Estos resultados indican que los estudios futuros que involucren los elementos Actínidos deben incluir efectos relativistas cuando se utilizan DFT o métodos de función de onda, especialmente cuando se realizan análisis que incluyen la descripción de los orbitales de frontera, que son fundamentales en la interpretación de reacciones químicas y futuras estrategias para lidiar con la basura nuclear.

Referencias:

[1] Goel, A.; McCloy, J. S.; Pokorny, R.; Kruger, A. A. *Challenges with vitrification of Hanford High-Level Waste (HLW) to borosilicate glass-An overview*, J. Non-Crys. Sol.: X, **4**, 100033 (2019); Vienna, J. D. *Nuclear waste vitrification in the United States: recent developments and future options*, Int. J. Appl. Glas. Sci. **1**, 309 (2010).
[2] Saue, T. *Relativistic Hamiltonians for Chemistry: A Primer*, ChemPhysChem. **12**, 3077 (2011).
[3] Chang, C.; Pelissier, M.; Durand, P. Regular *Two-Component Pauli-like Effective Hamiltonians in Dirac Theory*, Phys. Scr. **34**, 394 (1986); Van Lenthe, E.; Baerends, E. J.; Snijders, J. G. *Relativistic Total Energy Using Regular Approximations*, J. Chem. Phys. **101**, 9783 (1994).
[4] Gomes, A. S. P.; Saue, T.; Visscher, L.; Jensen, H. J. Aa.; Bast, R.; Aucar, I. A.; Bakken, V.; Dyall, K. G.; Dubillard, S.; Ekstrom, U.; Eliav, E.; Enevoldsen, T.; Faßhauer, E.; Fleig, T.; Fossgaard, O.;

Halbert, L.; Hedegard, E. D.; Helgaker, T.; Helmic, S. *DIRAC, a Relativistic Ab Initio Electronic Structure Program, Release DIRAC19*. (2019).
[5] J. M. Lévy-Leblond. Commun. Math. Phys. **6**, 286 (1967).

Sistema de control para experimentos pulsados con iones atrapados: puesta a punto y primeros experimentos

• Lucas Tomás Giardino,[1] Carla Johanna Crucianelli,[1] Nicolás Adrián Nuñez Barreto,[1,2] Christian Tomás Schmiegelow[1,2]

[1] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*
[2] *IFIBA, Conicet, Pabellón 1, Ciudad Universitaria, 1428 Buenos Aires, Argentina*

En este trabajo presentamos los resultados de los primeros experimentos pulsados con iones fríos de calcio atrapados en el Laboratorio de Iones y Átomos Fríos. Para esto se realizó la caracterización y puesta a punto de un sistema de control ARTIQ, basado en una FPGA que permite controlar entradas/salidas TTL y señales de radiofrecuencia con resolución temporal del nanosegundo.
Con este dispositivo se realizaron mediciones pulsadas con un ion atrapado en una trampa de Paul anular para estudiar fenómenos de dinámica poblacional. El proceso de enfriado de iones se realizó utilizando un láser en 397 nm que excita una transición dipolar $4S_{1/2} - 4P_{1/2}$ (que produce el enfriamiento) y un segundo láser de rebombeo en 866 nm, que fuerza el despoblamiento de un tercer nivel atómico metaestable $3D_{3/2}$, de alto tiempo de vida media, formando un ciclo cerrado de fluorescencia.
Las mediciones pulsadas realizadas se basan en un control preciso del encendido de los láseres, su modulación en frecuencia mediante dos moduladores acusto-ópticos en configuración double-pass, así también como la recolección de los fotones emitidos por fluorescencia mediante un tubo fotomultiplicador.
Se lograron registrar curvas de fluorescencia de un ion de $^{40}Ca^{+}$ atrapado en las transiciones $4S_{1/2}-4P_{1/2}$ y $3D_{3/2} - 4P_{1/2}$, permitiendo obtener entre otras cosas la eficiencia del sistema óptico de recolección de fotones y calcular la tasa de ramificación del estado $4P_{1/2}$.
Finalmente, se comparan los resultados obtenidos de la dinámica de la transición $4S_{1/2} - 4P_{1/2}$ con simulaciones numéricas de las ecuaciones de Bloch para un sistema de tres niveles tipo lambda que modelan el experimento realizado.

Estudio teórico / numérico de la difusión de hidrógeno en aleaciones base Zr-Nb

• Guillermo Beltramo,[1] Viviana Ramunni,[2,3] Roberto Pasianot[1,2,3]

[1] *Instituto Sabato - Comisión Nacional de Energía Atómica*
[2] *Centro Atómico Constituyentes, Comisión Nacional de Energía Atómica*
[3] *CONICET*

En el marco de los problemas de fisuración asistida por hidrógeno en los tubos de presión de los reactores nucleares tipo CANDU, estudiamos la influencia de la fase continua Zr-Beta (20% Nb - 80% Zr) sobre el coeficiente de difusión del hidrógeno, DH, en las aleaciones bifásicas Zr-Alaf / Zr-Beta. Proponemos un modelo fenomenológico de la difusión en tubos que constituye una mejora respecto de otros similares de literatura [1-2]. También estudiamos la influencia del contenido de Nb sobre el DH en la fase Zr-Beta (cúbica) empleando la teoría del estado de transición, provista de parámetros ab-initio calculados con el código SIESTA [3]. En particular, consideramos 9 aleaciones ordenadas con distintas concentraciones de Nb, y determinamos energías de activación efectivas mediante ajustes de Arrhenius para cada aleación. Encontramos que la concentración de Nb varía la energía de activación de forma no monótona, pasando por un máximo para Zr-50%Nb. Finalmente, observamos que la mayor difusividad en el sentido longitudinal del tubo vs la radial, predicha y medida, es consistente con la microestructura texturada del material. Concluimos que la pérdida de continuidad de las láminas de Zr-beta presentes en la microestructura de los tubos de presión, es consistente con la disminución de DH a medida que trascurre el tiempo a una dada temperatura.

Palabras Clave: Zr-Nb, Difusión de H, Ab-Initio, rotura diferida por hidrógeno.

Referencias:

[1] B.C. Skinner, and R. Dutton. *Hydrogen Difusivity in Alfa - Beta Zirconium Alloys and its Role in Delayed Hydride Cracking*. In *Hydrogen Efects on Material Behavior*, R. Moody and W. Thompson (Eds.). The Minerals, Metals Materials Society, pp. 73-83 (1990).
[2] A. Sawatzky, G.A. Ledoux, R.L. Tough, and C.D. Cann. *Hydrogen Difusion in Zirconium-Niobium Alloys*. In *Metal-Hydrogen Systems*, T.N. Vizeroglu (Ed). Pergamon Press, Oxford pp. 109-120 (1982).
[3] J.M. Soler, E. Artacho, J.D. Gale, A. García, J. Junquera, P. Ordejón, and D. Sánchez-Portal, *The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation*, J. Phys. Condens. Matter **14**, 2745 (2002).

Nuevos datos atómicos en la secuencia homóloga del orbital 4f para el Ne IV, Ar IV, Kr IV y Xe IV

• Monica Raineri,[1] Mario Gallardo,[2] Jorge Reyna Almandos,[2] Cesar José Bonjuani Pagan[3]

[1] *Centro de Investigaciones Opticas (CIOp), La Plata, Argentina*
[2] *Centro de Investigaciones Ópticas, CONICET La Plata - CIC-BA*
[3] *Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, Brasil*

En este trabajo se presentan nuevos resultados en la secuencia homologa del orbital 4f para las configuraciones 2s22p24f, 3s23p24f, 4s24p24f, 5s25p24f del Ne IV, Ar IV, Kr IV y Xe IV respectivamente. Los datos experimentales fueron obtenidos con una fuente de luz consistente en una descarga capilar pulsada desarrollada en el CIOp y en el caso particular del Kr IV también con un theta-pinch del Lund Instituto de Tecnología de Suecia. Datos espectroscópicos de estos iones son de importancia debido a sus aplicaciones en la física de colisiones, física del láser y astrófísica. Se estudian nuevos niveles de energía para el Ar IV y Kr IV y regularidades de los parámetros atómicos utilizando cálculos Hartree-Fock Relativistas (HFR), en donde se incluyeron efectos de polarización del carozo (CP).

Covalence and π electron delocalization influence on hydrogen bonds in proton transfer process of o-hydroxy aryl Schiff bases: a combined NMR and QTAIM analysis

• María Natalia Cristina Zarycz,[1] María Ayelén Schiel,[1] Emilio Angelina,[2] Ricardo Daniel Enriz[1]

[1] *Instituto Multidisciplinario de Investigaciones Biologicas San Luis*
[2] *Instituto de Química Básica y Aplicada del Nordeste (CONICET)*

Within the framework of the DFT approach we studied the relationship between the chemical nature of intramolecular hydrogen bonds (HB) and NMR parameters, *J* couplings and chemical shifts, δ, of atoms involved in such bonds in o-hydroxy aryl Schiff bases during the proton transfer process. For first time the shape of the dependence of the degree of covalence in HB on ^1J(N-H), ^1J(O-H), ^{2h}J(O-N), and $\delta(^1$H) during the proton transfer process in o-hydroxy aryl Schiff bases was analyzed. Parameters obtained from Bader's theory of atoms in molecules were used to assess the dependence of covalent character in hydrogen bonds with both NMR properties. Influence of -electronic delocalization on ^{2h}J(N-O) under the proton transfer process in Schif bases was investigated.^{2h}J(O-N) in a Mannich base was also studied in order to compare results with an unsaturated system. In addition substituent effects on the phenolic ring were investigated. Our results indicate that covalent character of hydrogen bond on both sides of the transition state undergoes a smooth exponential increase as the $\delta(^1$H) moves to down field. The degree of covalence of the N...H (O...H) bond increases continuously and linearly as ^1J(N-H) (^1J(O-H)) becomes more negative, even after reaching the transition state. Non-vanishing values of spin dipolar (SD) and paramgnetic spin orbital (PSO) terms of ^{2h}J(O-N) in Schiff bases show that π-electronic delocalization in the chelate ring has a non-negligible effect on tautomeric equilibrium and give evidence of the presence of the so called resonance assisted hydrogen bond (RAHB). Variation of SD term of ^{2h}J(O-N) follows a similar pattern as the change of the PDI aromaticity index of the chelate ring.

Simulaciones de los efectos de la temperatura, tamaño y presencia de defectos en la magnetización de nanopartículas metálicas

• Romina Aparicio,[1,2] Gonzalo dos Santos,[1,2] Eduardo Bringa[1,2]

[1] *CONICET*
[2] *Facultad de Ingeniería, Universidad de Mendoza*

En los últimos años se ha acrecentado el interés en el estudio de pequeñas partículas magnéticas debido a su amplio abanico de aplicaciones en tecnología, incluyendo la biomedicina y computación. Las propiedades magnéticas de estas nanopartículas (NP) se ven alteradas por los efectos de tamaño finito y la presencia de defectos. En este trabajo se estudia la influencia de estos defectos en las propiedades magnéticas de las NPs, en función de la temperatura y el diámetro de pequeñas partículas esféricas de Fe [1] y Ni. Se utilizan simulaciones atomísticas con dinámica de spin acoplada a dinámica molecular (Spin-Lattice Dynamics, Molecular Dynamics, SLD-MD) para analizar la evolución de las propiedades magnéticas de NPs con diámetros entre 2 nm y 8 nm, variando la temperatura de red y spin entre 10 K y temperaturas que superan la temperatura de Curie (T_C) correspondiente a cada elemento, considerando además un momento magnético uniforme al inicio de cada simulación. Se analizan las diferencias entre la magnetización de superficie y la del centro de la NP como producto del desorden local de spines, y su impacto sobre la magnetización total debido a los efectos de tamaño finito. Comparamos las simulaciones con estudios experimentales y con otros modelos, encontrando buen acuerdo con experimentos. También se calculan las susceptibilidades magnéticas de las NP, como alternativa para estimar la T_C para distintos tamaños. Por último, se hace un análisis de las consecuencias de la introducción de defectos generados a través de deformación mecánica, como por ejemplo twins, en las propiedades magnéticas de NP de Fe.

Referencias:

[1] G. Dos Santos *et al.*, Phys. Rev. B **102**, 184426 (2020).

Simulaciones de daño primario en una aleación de alta entropía: posible resistencia a la radiación

• Orlando Deluigi,[1,2] Roberto Pasianot,[2,3] Felipe Valencia,[4,5] Alfredo Caro,[6] Diana Farkas,[7] Eduardo Bringa[1,2,5]

[1] *Facultad de Ingeniería - Universidad de Mendoza*
[2] *CONICET*
[3] *Instituto Sabato - Comisión Nacional de Energía Atómica*
[4] *Centro para el Desarrollo de la Nanociencia y la Nanotecnología, Universidad de Santiago de Chile, Chile.*
[5] *Centro de Nanotecnología Aplicada, Facultad de Ciencias, Universidad Mayor, Santiago, 8580745, Chile*
[6] *George Washington University, USA*
[7] *Virginia Polytechnic Institute, Blacksburg, VA 2061, USA*

Aleaciones de alta entropía (High Entropy Alloys, HEA) han atraído considerable atención como materiales posiblemente resistentes al daño por radiación, y esto se atribuye a una conductividad térmica reducida junto a propiedades peculiares de la movilidad de defectos que se originan en la complejidad química. Para explorar el origen de este comportamiento, estudiamos los estadios tempranos de la irradiación, para tiempos menores a 1 ns, en un HEA utilizando simulaciones de dinámica molecular (molecular dynamics, MD). Las cascadas de colisiones son inducidas por un átomo al que se le otorga una gran energía inicial, para emular interacción con neutrones (primary knock-on atom, PKA). El átomo recibe 10, 20 o 40 keV generando una cascada de colisiones en una matriz de una HEA equiatómica FeNiCrCoCu, con estructura cúbica centrada en las caras (face-centered cubic, fcc). Se simulan cascadas equivalentes en el correspondiente material de 'Átomo Promedio'(AA), y también en Ni puro. Se incluyen pérdidas de energía por frenamiento electrónico. En nuestras simulaciones, la evolución de los defectos durante el daño primario, incluido el número de pares de Frenkel supervivientes, y las distribuciones del tamaño del grupo de defectos, son casi las mismas en todos los casos, dentro de nuestra incertidumbre estadística. El número de FP supervivientes en la aleación se predice bastante bien mediante modelos analíticos de producción de defectos en materiales puros. Todo esto indica que el origen de la resistencia a la radiación en los HEA, como se observa en los experimentos, puede no estar relacionado con una reducción del daño primario debido a la complejidad química, sino que probablemente se deba a la evolución de los defectos a tiempos largos [1].

Referencias:

[1] Deluigi, O. R., *et al.*, *Simulations of primary damage in a High Entropy Alloy: Probing enhanced radiation resistance*, Acta Materialia **213**, 116951 (2021). DOI

Ecuaciones de estimación generalizadas para medidas repetidas de repelencia de aceites esenciales contra Carpophilus dimidiatus (Fabricius) (Nitidulidae) y Oryzaephilus surinamensis (L.) (Silvanidae)

• Nieves Carolina Comelli,[1,2] Erlinda del Valle Ortiz,[3,4] Gabriel O. Denett,[2] María Rosa Rodriguez,[1] Mirta Evangelina Romero,[2] Gustavo David Rodriguez,[4] Silvia Bistoni,[2] Pablo Roman Duchowicz[5]

[1] *Centro de Investigaciones y Transferencia de Catamarca, CONICET*
[2] *Facultad de Ciencias Agrarias, Universidad Nacional de Catamarca*
[3] *CONICET*
[4] *Facultad de Tecnología y Ciencias Aplicadas - Universidad Nacional de Catamarca*
[5] *Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), CONICET - UNLP*

La producción de nuez en Catamarca presenta problemas fitosanitarios que no encuentran paliativos desde los enfoques convencionales de manejo de plagas. Coleópteros de las familias Nitidulidae y Silvanidae son responsables del deterioro de la nuez en sistemas rurales tradicionales de almacenamiento en la provincia de Catamarca. En el mercado, la estrategia disponible para controlar estos insectos plagas es el fosfuro de aluminio, un insecticida de clase I con poder gorgojicida y rodenticida, altamente tóxico. Su aplicación, debe satisfacer el cumplimiento de rigurosas normas de seguridad y asegurar un total hermetismo, caso contrario, puede derivar en intoxicaciones severas y mortales. En busca de nuevas alternativas de control, el uso de extractos vegetales obtenidos de plantas aromáticas es una opción válida por su eficacia, bajo impacto ambiental y bajo costo de producción. En este trabajo presentamos datos experimentales de la actividad repelente de 12 aceites esenciales evaluada a cinco concentraciones contra los gorgojos Carpophilus dimidiatus (Fabricius) (Nitidulidae) y Oryzaephilus surinamensis (L.) (Silvanidae) en condiciones de laboratorio. Los aceites esenciales (Rosmarinus officinalis, Origanum vulgare, Lippia turbinata (Griseb), Mentha piperita L., Schinus molle, Satureja parvifolia (Phil.) Epling, Lippia junelliana, Lavandula officinalis, Blepharocalyx salicipholius, Aloysia gratissima var gratissima, Minthastachys verticillata (Griseb) Epling, Aloysia gratissima) se aislaron del material vegetal mediante hidrodestilación y se analizaron por GC-MS. La actividad repelente se determinó usando el método de micro-atmósfera exponiendo insectos a papeles de filtro tratados con soluciones de aceites esenciales disueltos en acetona en placas de Petri. Valores promedio de repelencia para cada extracto fueron usados para clasificación de potencial de repelencia de los extractos clase 0 (PR 0,1%), clase I (PR = 0,1 a 20%), clase II (RP = 20,1 a 40%), clase III (40,1 -60%), clase IV (60,1 -80%) y clase V (80,1 -100%). En general, en el rango de concentraciones aplicadas, todos los aceites esenciales probados fueron activos hacia ambas especies de coleópteros y los valores promedio de repelencia de los tratamientos se asignaron principalmente a las clases de repelencia II-V. Particularmente, el aceite esencial de S. molle mostró la actividad de repelencia más alta (88,93% en C. dimidiatus y 79,33% en O. surinamensis) mientras que los aceites esenciales de L. officinalis y M. piperita L. fueron menos repelentes (56,45% en C. dimidiatus y 1,47% en Oryzaephilus spp.). Efectos de tipo y dosis de los aceites esenciales y el tiempo de exposición sobre el comportamiento de los insectos (valores medios de repelencia) se evaluó mediante regresión de medidas repetidas utilizando Ecuaciones de Estimación Generalizadas (GEE). Esta aproximación se utiliza porque los valores medios de repelencia siguen patrones de distribución asimétrica con varianza no constante y hay correlación entre el comportamiento de los insectos, las dosis de aceites esenciales y el tiempo de exposición. Particularmente, se observan altos niveles de eficacia repelente a altas dosis de aceites esenciales y tiempo de exposición.

Predicción de la hipersuperficie de energía de una dada estructura cristalina usando redes neuronales

• Pablo Gaztañaga,[1,2] Gabriel Pagola,[1,2] Marta Ferraro,[1,2] Anita Orendt,[3] Julio Facelli[4]

[1] *Instituto de Física de Buenos Aires, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales CONICET- Universidad de Buenos Aires*
[2] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*
[3] *Center for High Performance Computing, University of Utah, Salt Lake City, US*
[4] *Department of Biomedical Informatics, University of Utah, Salt Lake City, US*

Nuestro grupo trabaja en la predicción de estructuras de cristales moleculares usando un código propio basado en algoritmos genéticos, Modified Genetic Algorithms for Crystals (MGAC), en el cual, las optimizaciones locales de las estructuras se realizan a nivel Density Functional Theory (DFT) empleando el código Quantum Espresso (QE). [1] Dado que estos cálculos insumen mucho tiempo de cómputo, estamos diseñando la implementación una red neuronal para obtener los valores de energía del sistema, en forma similar a la previamente reportada por Behler y Parrinello, donde la energía del sistema se obtiene como la suma de las energías de cada uno de los átomos que lo componen. [2] Esta red se desarrolló utilizando el paquete Tensor Flow. [3] Las redes realizan un aprendizaje supervisado siendo alimentadas en la entrada con los descriptores de la estructura y minimizando el error cuadrático medio entre la energía predicha y la obtenida en cálculos de QE.
La selección del conjunto de parámetros de entrada de la red neuronal (descriptores) que permitan representar lo mejor posible a la estructura cristalina resulta ser una cuestión crucial. Dichos descriptores deben ser invariantes desde el punto de vista traslacional y rotacional y no depender de la elección (relativamente arbitraria) de la celda unidad empleada y además deben permitir describir cristales de cualquier grupo cristalográfico, que contengan, por ejemplo, distintos números de moléculas en la cela unidad, distintas operaciones de simetría, etc. Por último, los descriptores deben ser lo suficientemente versátiles para poder representar unívocamente a cada cristal. En nuestro caso, hemos comenzado con descriptores sugeridos en la literatura. [4]
La red neuronal busca obtener la hipersuperficie de energía en función de los descriptores que representan al cristal molecular y obtener sus mínimos con un nivel de precisión comparable con el propio QE, evitando ese cálculo costoso. Para poder construir la hipersuperficie mencionada, se utilizan las coordenadas cristalinas y las energías de todos los pasos intermedios del proceso de convergencia de QE y no sólo las del cristal optimizado.
En este trabajo se presentan un conjunto de resultados preliminares del entrenamiento de redes neuronales con distintas arquitecturas y diferentes descriptores, empleando como sistema molecular de testeo al metanol. Se ha elegido este sistema por ser pequeño y de interés en la bibliografía [5].

Referencias:

[1] www.quantum-espresso.org
[2] Behler, M. Parrinello, Phys. Rev. Lett. **98**, 146401 (2007).
[3] www.tensorflow.org
[4] P. Geiger, and C. Dellago, J. Chem. Phys. **139**, 164105 (2013); J. S. Smith, O. Isayev, and A. E. Roitberg, Chem. Sci. **8**, 3192 (2017).
[5] Tzu-Jen Lin, Cheng-Rong Hsing, Ching-Ming Wei, and Jer-Lai Kuo, Phys. Chem. Chem. Phys. **18**, 2736 (2016).

Convergencias para las Series y Transformada de Fourier y Laplace

• Teresita Alejandra Rojas,[1] JOSE L. NIEVA,[1] Patricia Isabel Zeballos,[1] Federico Galay[1]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad Nacional de Catamarca*

La convergencia del desarrollo en serie de Fourier, la acotación de operadores, la rapidez de convergencia de los operadores (Transformada de Fourier, Laplace) juegan un papel importante en soluciones de muchas ecuaciones y aplicaciones de la física- matematica, problema que tuvo sus inconvenientes en determinados espacios, desde el origen de las series de Fourier. En este trabajo se realiza un análisis y estudio de las condiciones que deben cumplir las funciones y los espacios con el fin de ver la convergencia en los espacios de Lebesgue.

Integrales Singulares en Espacios de medida

• Teresita Alejandra Rojas,[1] JOSE L. NIEVA,[1] Andres Bizotto,[1] ANDRES ALBERTO DENETT,[1] Tamara Avellaneda[1]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad Nacional de Catamarca*

Catamarca El objetivo del presente es analizar los operadores usados en las integrales singulares y su aplicación al estudio de la convergencia del desarrollo en serie de Fourier en espacios de funciones integrables en espacios de Lebesgue. Para ello se analiza la teoría de integrales singulares desarrollada por Calderon-Zygmund y sus aplicaciones a la convergencia en serie de Fourier, mostrando como resultado una desigualdad importante que es muy útil en la demostración de la convergencia en espacios de Lebesgue.

Sucesión de Operadores Acotación con el Lema de Cotlar

• Teresita Alejandra Rojas,[1] JOSE L. NIEVA,[2] Federico Galay,[1] Marcos Juarez,[1] Javier Peralta[1]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad Nacional de Catamarca*
[2] *Dep. Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Catamarca*

Se realiza un análisis de la teoría de integrales singulares con el objeto de analizar específicamente los operadores usados en las integrales singulares y la necesidad de su aplicación al análisis de la convergencia del desarrollo en serie de Fourier en espacios de funciones integrables en espacios de Lebesgue mediante las acotaciones de sucesiones de operadores que cumplen las condiciones del lema de Cotlar y su generalización

Las transformadas de Fourier y Laplace y Convergencia

• Teresita Alejandra Rojas,[1] JOSE L. NIEVA,[1] Roberto Rodriguez,[1] GUSTAVO GANDINI[1]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad Nacional de Catamarca*

En este trabajo se realiza un estudio de los operadores transformadas de Fourier y Laplace y la teoría de las funciones integrables y su aporte al problema de la Convergencia de los desarrollos de Fourier en espacios de medida.

Relaciones de mayorización entre la coherencia cuántica y la impureza

• Yanet Alvarez,[1,2] Gustavo M. Bosyk,[1,3] Marcelo Losada,[4] Mariela Portesi[1,2]

[1] *Instituto de Fisica La Plata, CONICET-UNLP, La Plata*
[2] *Facultad de Ciencias Exactas - Universidad Nacional de La Plata*
[3] *Università degli Studi di Cagliari*
[4] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*

Singh *et al.* investigaron los límites impuestos por la mezcla de un sistema cuántico sobre la cantidad de coherencia cuántica presente en el sistema [1]. En particular, encontraron una cota no trivial a la suma de la coherencia medida con la norma ℓ_1 y la mezcla medida con la entropía lineal. Hallaron ademas una relación de compromiso entre la entropía relativa de coherencia y la entropía de von Neumann. Basandose en estos resultados, se espera que este compromiso entre la coherencia y la impureza sea una característica general de los sistemas cuánticos, independientemente de las medidas de coherencia e impureza utilizadas.
Aquí estudiamos cuantificadores más generales de la coherencia e impureza, a saber: el vector de coherencia generalizado $\nu(\rho)$ introducido en [2] y el vector de autovalores $\lambda(\rho)$, respectivamente. Observamos que existe una cota no trivial al producto tensorial $\nu(\rho)\otimes\lambda(\rho)$ entre ambos vectores, que captura el compromiso entre la coherencia y la mezcla en forma general. Finalmente, obtenemos la cota óptima para sistemas de un qubit, buscando el ínfimo en el lattice de mayorización al producto tensorial indicado.

Referencias:

[1] U. Singh, M. Nath Bera, H. S. Dhar, and A. K. Pati. *Maximally coherent mixed states: Complementarity between maximal coherence and mixedness*, Phys. Rev. A **91**, 052115 (2015).
[2] G. M. Bosyk, M. Losada, C. Massri, H. Freytes, and G. Sergioli. *Generalized coherence vector applied to coherence transformations and quantifiers*, Phys. Rev. A **103**, 012403 (2021).

Propiedades espectrales de excitones en puntos cuánticos semiconductores usando un modelo de masa efectiva

• Nicolás Legnazzi,[1,2] Omar Osenda[1,2]

[1] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*
[2] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*

Las nanoestructuras formadas en semiconductores son de gran interés tanto desde el punto de vista tecnológico como desde el punto de vista de sus propiedades físicas básicas. El confinamiento producido por la nanoestructura altera la estructura de bandas del semiconductor y, correspondientemente, los estados electrónicos.
Dependiendo el fenómeno de interés a ser estudiado, los modelos utilizados para estudiar al mismo deben incluir la posibilidad de que la descripción del problema involucre varias bandas de niveles electrónicos. Esto es así en el estudio de los excitones, es decir, pares electrón-hueco, cuyas propiedades físicas en una muestra macroscópica (o bulk) puede modelarse mediante una partícula ubicada en la banda de conducción (el electrón) y otra ubicada en la banda de valencia (el hueco). De esta forma, el agregado de un punto cuántico semiconductor a una matriz semiconductora modifica ambas bandas, pudiendo aparecer niveles de energía discretos permitidos cerca del fondo de la banda de conducción y del tope de la banda de valencia. Un excitón esta confinado en el punto cuántico cuando un electrón se aloja en dichos niveles discretos cerca de la banda de conducción y un hueco se aloja en los niveles discretos por encima de la banda de valencia. Se estudian las propiedades espectrales de excitones confinados en puntos cuánticos de Arseniuro de Galio en la aproximación de masa efectiva de dos bandas.
El efecto del punto cuántico es modelado usando potenciales de confinamiento para el electrón y el hueco, mientras que la la presencia de las dos bandas de niveles de interés se ve reflejada en el uso de la 'masa efectiva' de cada partícula en el Hamiltoniano del sistema. El Hamiltoniano resulta así una ecuación 'de Schrödinger' para dos partículas con masas distintas y que interactúan mediante el potencial de Coulomb electrostático de dos cargas puntuales, sin condiciones de contorno. El potencial de confinamiento posee simetría esférica.
Usando el método variacional de Rayleigh-Ritz se obtienen valores aproximados para la energía el estado fundamental. Para implementar el método se utilizan dos técnicas muy comunes en Físico Química, se escribe el Hamiltoniano en coordenadas bipolares, en las cuales la interacción adquiere una forma muy simple y se utilizan las funciones de Hylleras como base de funciones para el método variacional de Rayleigh-Ritz. Los elementos de matriz resultantes se pueden expresar en términos de integrales de funciones hipergeométricas. Se obtienen resultados para el valor de expectación del potencial de Coulomb en función de los parámetros característicos del punto cuántico, radio y profundidad del potencial.
El valor de expectación de la interacción de Coulomb también es calculado usando Teoría de perturbaciones independiente del tiempo. Para dicho calculo se uso como estados del sistema sin perturbar las soluciones variacionales de un electrón confinado y de un hueco confinado, cada uno aislado y no interactuantes.
Con los resultados obtenidos se discute la relación entre los umbrales de ionización para el sistema usando los resultados perturbativos y los del cálculo con interacción 'completa'.

Desarrollo y fabricación de un resonador helicoidal para alimentar una trampa lineal de Paul

• Agustin Mariano Romboa,[1] Federico Gastón Pietra,[2] Christian Schmiegelow,[2,3] Lautaro Filgueira[1,3]

[1] *Departamento de Fisica, FCEyN, UBA*
[2] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*
[3] *Instituto de Física de Buenos Aires, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales CONICET- Universidad de Buenos Aires*

Se desarrolló y fabricó un resonador helicoidal una trampa de Paul lineal dinámica que será utilizada para construir un reloj atómico óptico y para experimentos de simulaciones cuánticas. Esta trampa se utilizará para atrapar cadenas de iones de Iterbio mediante una combinación de un campo eléctrico oscilante y otro constante, que se imponen a través de distintos electrodos. Para el campo dinámico se requieren dos características principales: una frecuencia aproximada de 6 MHz y una amplitud de 450 V. Dichos potenciales y frecuencia no son alcanzables fácilmente con tecnología de estado sólido. Por este motivo, es usual utilizar un generador de funciones seguido de un amplificador de radio frecuencias, que permiten entregar hasta una amplitud de 24 V y luego elevar la tensión con un resonador helicoidal. Adicionalmente, el alto factor de mérito (Q) que se logra con un resonador helicoidal permite filtrar el ruido adicional de la señal oscilante. Dicho beneficio es fundamental para minimizar la incertidumbre en la realización de un estándar metrológico de tiempo.

Quantum-Drift y tridiagonalización de Lanczos para estudiar el transporte en un Árbol de Cayley con procesos decoherentes

• Fabricio Simon Lozano Negro,[1,2] Pablo R. Zangara,[1,2] Horacio M. Pastawski[1,2]

[1] *Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación, FAMAF-UNC, Argentina*
[2] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*

El transporte y la dinámica cuántica bajo procesos decoherentes ha ganado interés en los últimos años con el auge de las tecnologías cuánticas, donde es imperativo conocer el efecto de ruidos y perturbaciones no controladas en el sistema. La solución exacta o numérica de sistemas cuánticos grandes, tendiendo a macroscópicos, es un problema prácticamente imposible de abordar. Uno requiere, entonces, de soluciones parciales o modelos donde pueda extraer información de la física del sistema de manera aproximada. En este trabajo, mostramos cómo usando el método de tridiagonalización de Lanczos , se puede simplificar el sistema y obtener resultados interesantes. En particular cuando hay un gradiente de campo que disminuye exponencialmente con la distancia al centro, este desintoniza los espines y limita la difusión. Sin embargo, se pueden incluir procesos decoherentes, en la aproximación (Quantum-Drift) y evolucionando la dinámica con fluctuaciones en las energías. En este caso se observa que la decoherencia habilita la difusión de polarización hacia la periferia.

Machine learning aplicado a problemas de mecánica cuántica

• Facundo Serrano,[1] Omar Osenda,[1] Martin Dominguez[1]

[1] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*

El aprendizaje automático puede ser utilizado para determinar modelos óptimos a partir de conjuntos de datos de lo más variado, en problemas de clasificación, reconocimiento de patrones, etc. En el caso de la Mecánica Cuántica se lo propone, en muchos casos, como una alternativa a los métodos variacionales tradicionales. En el caso de cadenas de espines, por ejemplo, se logran mejores aproximaciones para la energía del estado fundamental del modelo de Ising con campo transversal y para el modelo XX anti-ferromagnético, que las que se obtienen con DMRG, PEPS y MERS utilizando, aproximadamente, los mismos recursos numéricos. Los modelos de espín se adecuan naturalmente al carácter discreto de las redes, o grafos, donde se implementa una representación del estado cuántico, también llamada estado cuántico neuronal (quantum neural state). En el caso de sistemas de pocas partículas se logra implementar el problema utilizando variables gaussianas y discretas en una red conocida como "máquina de Boltzman restringida" (restricted Boltzmann machine), la cual recibe su nombre debido a la particular arquitectura y a los pesos estadísticos que se le asigna a las variables de la red. Se analizaron dos models fisicos muy conocidos, un sistema de pocas partículas atrapadas en una trampa armónica y el modelo de Calogero regularizado para dos partículas, utilizando los resultados obtenidos con un programa desarrollado en Python. Se comparó con resultados obtenidos en redes similares que utilizan distintos algoritmos de muestreo/aprendizaje. También se implementó, utilizando las propiedades modulares del programa, un algoritmo genético como método de muestreo. Esta modificación puede resultar en mejores resultados en sistemas fuertemente interactuantes.

Estudio de la dinámica de un electrón en cadenas de quantum dots bajo la acción de un campo eléctrico con diferentes perfiles temporales

• María Estefanía Rus,[1] Sergio Santiago Gómez,[1] Rodolfo Horacio Romero[1]

[1] *Instituto de Modelado e Innovación Tecnológica (CONICET - Universidad Nacional del Nordeste)*

El estudio de la manipulación y transporte de estados cuánticos en sistemas de quantum dots es un tema de gran relevancia en la actualidad para aplicaciones relacionadas al procesamiento y transferencia de información cuántica. En este trabajo se estudia la dinámica de un electrón en una cadena lineal de N quantum dots en presencia de un campo eléctrico dependiente del tiempo. El análisis se centra en la comparación de distintos perfiles temporales del campo aplicado, utilizando estrategias de atajo a la adiabaticidad (STA) para conseguir una transferencia óptima de la partícula del primer al último sitio de la cadena. Además, se consideran efectos de espín-órbita y defectos en el diseño del sistema para estudiar la robustez del protocolo STA ante posibles cambios en la proyección del espín electrónico y errores de fabricación del dispositivo.

Control no adiabático de puertas lógicas de estados entrelazados en cadenas de puntos cuánticos

• Alejandro Bendersky,[1] Rodolfo H. Romero,[2] Sergio S. Gomez[2]

[1] *Dpto. de Física - Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura - Universidad Nacional del Nordeste*
[2] *Instituto de Modelado e Innovación Tecnológica (CONICET - Universidad Nacional del Nordeste)*

Los qubits de espín en sistemas de puntos cuánticos (quantum dots, QDs) semiconductores son sistemas características adecuadas para la manipulación de estados cuánticos requeridos para el procesamiento de información. Para su implementación práctica es necesario garantizar la transferencia rápida y eficaz de los estados controlados. El entrelazamiento de los estados proporciona un recurso adicional para la implementación de puertas cuánticas lógicas. Recientemente se ha demostrado la viabilidad y fidelidad de transferencia de estados de uno y dos espines tanto mediante la variación adiabática de los acoplamientos de intercambio entre los puntos cuánticos de cadenas de tres y cuatro QDs. Sin embargo, la modulación adiabática de los acoplamientos tiene la desventaja de extender los tiempos de transferencia, exponiendo a los estados a efectos de decoherencia que deterioran la fidelidad, más aún en cadenas de mayor longitud. En este trabajo proponemos un protocolo no adiabático para la implementación de puertas cuánticas en cadenas de puntos cuánticos, y analizamos su velocidad y robustez.

Maximizing information obtainable by quantum sensors with the Quantum Zeno Effect

• Analía Zwick,[1,2] Bruno Ronchi,[3,4] Gonzalo A. Alvarez[2,3,5]

[1] *Instituto de Nanociencia y Nanotecnología, CNEA, CONICET, Centro Atómico Bariloche, Av. Bustillo 95 (84) S. C. Bariloche, Argentina.*
[2] *Centro Atómico Bariloche - CONICET, Comisión Nacional de Energía Atómica*
[3] *Instituto Balseiro - Universidad Nacional de Cuyo*
[4] *Centro Atomico Bariloche - Comisión Nacional de Energía Atómica*
[5] *Instituto de Nanociencia y Nanotecnología, CNEA, CONICET, Centro Atómico Bariloche, Av. Bustillo 9500 (8400) S. C. Bariloche, Argentina.*

Quantum estimation theory can be exploited to use quantum systems as meaurement devices. We have recently demonstrated that proper quantum dynamical control on a quantum sensor makes more efficient the estimation of the parameters that characterize its environment at the molecular or nanometric scales [1-4]. We here consider a 1/2-spin as a magnetic field sensor, subjected to periodic projective measurements. Projective measurements serve as a control tool, which turns a coherent oscillating evolution into an exponential decaying evolution, where the information of the coherent field is then codified into the decay rate, instead of the oscillation frequency. We demonstrate with quantum information theory that when an off-resonance alternating magnetic field is probed, the projective evolution magnifies information on the magnetic field's strength [5]. We define the parameter regimes where this inference protocol outperforms the free evolution of the sensor. We show applications of the method for determining molecular structures with quantum sensors.

Referencias:

[1] A. Zwick, G. A. Álvarez, and G. Kurizki, Phys. Rev. Applied **5**, 014007 (2016).
[2] A. Zwick, G. A. Álvarez, and G. Kurizki, Phys. Rev. A **94**, 042122 (2016).
[3] V. Mukherjee, A. Zwick, A. Ghosh, X. Chen, and G. Kurizki, Commun Phys **2**, 162 (2019).
[4] A. Zwick, D. Suter, G. Kurizki, and G. A. Álvarez, Phys. Rev. Applied **14**, 024088 (2020).
[5] B. Ronchi, A. Zwick and G. A. Álvarez, *Maximizing information obtainable by quantum sensors with the Quantum Zeno Effect*, To be submitted.

Teleportando estados mixtos

• Diego Bussandri,[1] Mariela Portesi,[1,2] Ana Majtey[3,4]

[1] *Instituto de Física La Plata, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP - CONICET*
[2] *Instituto de Física, Facultad de Cs. Exactas, Universidad Nacional de La Plata*
[3] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*
[4] *Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas*

Mostramos que un estado separable de Werner utilizado como recurso del protocolo de teletransportación estándar cuántico puede conducir a una fidelidad promedio mayor que la clásica si los estados a teleportar pueden ser mixtos. Este es el punto inicial de una investigación más amplia en la cual revisamos el protocolo de teleportación para distribuciones de estados iniciales más generales que la usual (estados puros), consideramos distintos estados recurso y diferentes mediciones. Los resultados señalan que se puede superar el score (fidelidad media) clásico incluso con estados clásicos-cuánticos pero al eliminar las correlaciones de la medición, la fidelidad promedio del protocolo cuántico siempre cae por debajo de la contraparte clásica.

Out-of-time ordered correlators (OTOC), complejidad y entropia en sistemas bipartitos

• Pablo Daniel Bergamasco,[1] Gabriel G. Carlo ,[1,2] Alejandro Mariano Fidel Rivas[1,2]

[1] *Departamento de Fisica, Tandar CNEA*
[2] *CONICET*

El out-of-time-order correlator (OTOC) se ha vuelto relevante en distintas áreas de la física, desde la teoría de muchos cuerpos y física de altas energías hasta caos cuántico. En recientes trabajos, se ha puesto foco en este indicador como medida de complejidad cuántica, permitiendo distinguir entre dinámicas regulares, caóticas o mixtas. En la misma línea, recientemente también fue introducida la entropía de separabilidad de Wigner (WSE) y su contraparte clásica, lo que nos permite estudiar de igual forma distribuciones cuánticas y clásicas en el espacio de fase. Por otro lado, se ha probado que la suma de OTOCs sobre una base completa de operadores esta estrictamente relacionada con la segunda entropía de Renyi, conocido como teorema OTOC-RE. En este trabajo, nos enfocamos en estudiar el comportamiento del OTOC comparándolo con la WSE en un sistema bipartito conformado por dos mapas de gato acoplados y perturbados con diferentes dinámicas: Doblemente hiperbólica, doblemente elíptica y mixta. En todos los casos, encontramos que el OTOC y la WSE tiene esencialmente el mismo comportamiento, permitiendo una completa caracterización del sistema. Por otro lado, utilizando el mismo sistema, hemos verificado el cumplimiento del teorema OTOC-RE para distintas bases de operadores: Pauli, traslacion y reflexión, encontrando que solo una pequeña fracción de dicha base es necesaria para obtener una muy buena aproximación de la entropía, mas aun la representación en el espacio de fase de este conjunto de operadores revelan la dinámica clásica subyacente.

Separabilidad uniforme y alternante en sistemas de cuánticos de n niveles

• Federico Petrovich,[1] Raul Rossignoli,[2,3] Norma Canosa[3]

[1] *Instituto de Física de La Plata, CONICET*
[2] *Comisión de Investigaciones Científicas (CIC), La Plata (900)*
[3] *Instituto de Física La Plata, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP - CONICET*

Se examina el problema de la separabilidad del estado fundamental exacto en sistemas cuánticos fuertemente interactuantes. Se derivan condiciones totalmente generales de separabilidad y su formulación en términos de ecuaciones de pares, tanto para sistemas de componentes distinguibles como indistinguibles. Se analizan luego dos clases de soluciones separables: uniformes y alternantes. El formalismo es aplicado a sistemas de n niveles con simetría SU(n), obteniéndose condiciones analíticas de separabilidad para ambos tipos de soluciones, que generalizan y extienden resultados previos para sistemas de espines. Se muestra que estos estados fundamentales separables no triviales rompen simetrías fundamentales del Hamiltoniano y están asociados a puntos críticos cuánticos en los que el estado fundamental es excepcionalmente degenerado.

Esquemas tomográficos para la estimación de estados cuánticos en presencia de simetrías

• Inés Corte,[1] Lorena Rebón,[1] Federico Holik[1]

[1] *Instituto de Física La Plata, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP - CONICET*

La determinación del estado de un sistema cuántico [1] es una de las tareas centrales en muchas de las aplicaciones de la teoría de la información cuántica. Sin embargo, dado que la cantidad de mediciones independientes necesarias para realizar una tomografía cuántica completa crece exponencialmente con el número de qubits, es necesario recurrir a esquemas tomográficos alternativos que permitan reducir la cantidad de recursos experimentales y de cómputo que requiere esta tarea. Tal es el caso del esquema de tomografía cuántica permutacionalmente invariante [2,3], que propone estimar sólo la parte del estado, a priori desconocido, que es simétrica ante permutaciones. Este problema crece polinomialmente con el número de subsistemas y permite reconstruir en forma óptima una variedad de estados de interés.
En este trabajo, presentamos una extensión de dicho esquema que puede ser aplicado a un conjunto más amplio de simetrías. Apelando a técnicas matemáticas basadas en teoría de grupos [4], la implementación se simplifica y es posible desarrollar un esquema tomográfico que funcione de forma algorítmica para simetrías arbitrarias.

Referencias:

[1] M. Paris and J. Rehacek, *Quantum State Estimation*, Springer Publishing Company, (2010).
[2] G. Tóth, W. Wieczorek, D. Gross, R. Krischek, C. Schwemmer, and H. Weinfurter, Phys. Rev. Lett. **105**, 250403 (2010).
[3] T. Moroder, P. Hyllus, G. Tóth, C. Schwemmer, A. Niggebaum, S. Gaile, O. Gühne and H. Weinfurter, invariant state reconstruction, New J. Phys. **14**, 105001 (2012).
[4] M. Losada, F. Holik, C. Massri, and A. Plastino, *Solutions for the MaxEnt problem with symmetry constraints*, Quantum Inf. Process. **18**, 293 (2019).

Manupulación del Spin de un Átomo Aislado

• Santiago A. Rodriguez,[1] Sergio S. Gómez,[1] Alejandro Ferrón,[1] Joaquín Fernández-Rossier[2]

[1] *Instituto de Modelado e Innovación Tecnológica, CONICET-UN del Noreste*
[2] *International Iberian Nanotechnology Laboratory*

Las potenciales aplicaciones de la Electron Spin Resonance (ESR) utilizando un microoscopio de escaneo tunel (STM) han despertado un gran interés en diferentes áreas de investigación. En este trabajo nos centramos en el problema del control eléctrico y la modulación de la frecuencia de resonacia de spin mediante el campo eléctrico (tanto alterno RF como continuo DC) de la punta del STM, como así también el acoplamiento entre los diferentes estados causantes de las transiciones observadas experimentalmente. Analizamos particularmente el caso del átomo de Fe y molécula de TiH depositados en una bicapa de MgO (sobre Plata MgO/Ag(100)) ubicados sobre un átomo de Oxígeno por separado y estudiamos la interacción de ellos con la punta del STM. Dado que la distancia entre la punta y el átomo se puede cambiar durante el experimento, los mecanismos involucrados en la interacción punta-átomo (o punta-molécula) cambian. Para controlar la frecuencia de resonancia, debemos comprender todos los mecanismos involucrados en estos experimentos. Sabemos, debido a experimentos y a trabajos teóricos recientes, que en la interacción punta-átomo intervienen mecanismos tales como el intercambio (exchange coupling), interacción dipolar (dipolar coupling) e, incluso, hay indicios de que la modulación del campo cristalino tiene gran influencia. Para analizar los distintos escenarios que podemos presenciar durante el experimento, realizamos cálculos mediante la diagonalización directa de un Hamiltoniano CI considerando los 6 electrones en la capa 3d del átomo de Fe y 1 electrón en la capa 3d para el TiH. Todos los modelos microscópicos son construidos usando teoría del funcional densidad (DFT) y empleando información de los experimentos mas recientes. Además, trabajamos con un Hamiltoniano efectivo de spín que permite obtener expresiones analíticas que ayudan a comprender algunos de los resultados mas importantes.

Entrelazamiento de dos cuerpos en sistemas superconductores

• Juan Agustin Cianciulli,[1] Raúl Rossignoli,[1,2] Marco Di Tullio[1]

[1] *Instituto de Física de La Plata, Dpto. de Física, FCE - UNLP*
[2] *Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires*

El entrelazamiento cuántico es una de las características fundamentales de la mecánica cuántica. El concepto estándar de entrelazamiento esta definido para sistemas de componentes distinguibles. En el caso de sistemas de partículas indistinguibles, la noción de entrelazamiento es menos clara. Recientemente se ha desarrollado un formalismo de entrelazamiento fermiónico basado en la matriz densidad de un cuerpo. En sistemas de N fermiones, el entrelazamiento de un cuerpo admite también una formulación bipartita como entrelazamiento entre 1 fermión y los restantes $(N-1)$ fermiones. Este esquema fue recientemente extendido a particiones más generales, introduciéndose el concepto de entrelazamiento de M-cuerpos en estos sistemas asociado a la matriz densidad de M cuerpos y la correspondiente representación bipartita $M-(N-M)$.Con este formalismo, se analiza en detalle el entrelazamiento en el estado fundamental de un sistema fermiónico fuertemente interactuante típico, como es el caso de un sistema superconductor finito descripto por una interacción de apareamiento. Se estudia en particular el entrelazamiento de 2 cuerpos, en donde se destaca el surgimiento de un autovalor dominante mayor a 1 en la matriz densidad de dos cuerpos. La relación del espectro de esta matriz con la correspondiente descomposición bipartita del estado permite representar al mismo de manera aproximada como un condensado de bosones. De este modo, la representación bipartita asociada a la matriz de M-cuerpos, permite caracterizar en forma sistemática a estados fermiónicos con un número de partículas definido.

Generalización de la familia de estados gaussianos vía el principio MaxEnt

• Juan Mauricio Matera,[1] Federico Tomás Benito Pérez[2]

[1] *Instituto de Física La Plata, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP - CONICET*
[2] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP*

Uno de los principales problemas con que nos enfrentamos al representar sistemas cuánticos compuestos es que la descripción de sus estados (y su dinámica) involucra objetos (los operadores densidad) que contienen la información de todas las posibles correlaciones de n-cuerpos en el sistema. Una notable excepción la representan las dinámicas gaussianas. En estas dinámicas, realizables en sistemas compuestos por modos bosónicos, la dinámica es cerrada sobre el conjunto de los estados gaussianos, que es parametrizable en términos de las correlaciones de pares. Esto ha motivado a buscar generalizaciones de los estados gaussianos a sistemas no necesariamente bosónicos.
En este trabajo, se propone una generalización basada en la propiedad Max-Ent de los estados gaussianos, en la que consideraremos familias de estados que maximizan la entropía del sistema, bajo la restricción de fijar los valores medios de un cierto conjunto de observables independientes. Se discutirán entonces estrategias para construir aproximaciones dentro de esta familia, que representen estados arbitrarios. Como caso de aplicación, estudiaremos la entropía relativa entre los estados que resultan de la dinámica en el modelo de Dicke con sus correspondientes estimaciones como estados MaxEnt definidos por sus valores medios locales y correlaciones de dos cuerpos.

Efecto Casimir Dinámico en cavidades dobles y su análogo utilizando circuitos superconductores cuánticos

• Cruz Ignacio Velasco,[1] Paula Villar,[1,2] Nicolás Del Grosso[1,2]

[1] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*
[2] *Instituto de Física de Buenos Aires, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales CONICET- Universidad de Buenos Aires*

Las fluctuaciones de vacío cuánticas son una característica que distingue a la teoría cuántica de campos de su contraparte clásica. La fuerza atractiva entre dos placas perfectamente conductoras, conocida como fuerza de Casimir o efecto Casimir estático[1], observada hace ya más de 20 años corroboró la existencia de estas fluctuaciones para campos cuánticos en cavidades estáticas[2]. El efecto Casimir dinámico, por otro lado, agrupa todos los fenómenos que resultan en la perturbación del vacío a partir de la variación de la posición o alguna otra propiedad de los contornos que confinan a un campo[3]. Entre estos fenómenos, se encuentra la creación de fotones a partir del movimiento de una de las paredes de una cavidad perfectamente conductora.
En este trabajo se presenta, en primer lugar, el estudio de la creación de fotones en una doble cavidad perfectamente conductora. Ambas cavidades se encuentran acopladas a partir de una pared dieléctrica móvil cuya permitividad finita es un parámetro relevante en el análisis. La consideración de este parámetro permite una descripción más realista de los resultados obtenidos anteriormente para cavidades perfectamente conductoras[4]. Los cálculos necesarios para determinar el número de partículas creadas son, en general, imposibles de resolver de manera analítica. Por este motivo, el estudio se realiza a partir de simplificaciones analíticas empleando el análisis de escalas múltiples (MSA). Este método se ha utilizado para estudiar el DCE en distintos sistemas de cavidades dinámicas[5]. Aún así, para tener un conocimiento completo del sistema es necesario emplear técnicas numéricas. A partir de estas técnicas es posible conocer el rango de validez de los métodos analíticos y estudiar el comportamiento del sistema más allá de dicho rango[6]. De todas formas, debe aclararse que este tipo de sistemas no permite una verificación experimental del DCE a partir de la tecnología actual. A pesar de esto es posible asociar a este sistema "mecánico" con uno análogo en el cual un SQUID acopla ambas cavidades. El SQUID permite imponer condiciones de contorno dependientes del tiempo a través de la aplicación de un campo magnético variable. Este tipo de configuraciones la creación de fotones por el efecto Casimir ha sido observada recientemente[7]. El análisis de estos sistemas se realiza a partir de los mismos métodos que el ejemplo mecánico, tanto a partir de las simplificaciones analíticas como a partir de las técnicas numéricas y por lo tanto permiten comparaciones con el primer caso.

Referencias:

[1] H.B.G. Casimir, Indag. Math. **10**, 261 (1948).
[2] S.K. Lamoreaux, Phys. Rev. Lett. **78**, 5 (1997); U. Mohideen and A. Roy, Phys. Rev. Lett. **81**, 4549 (1998).
[3] V. Dodonov, MDPI Physics **2**, 67 (2019).
[4]D.A.R. Dalvit and F.D. Mazitelli, Phys. Rev. A. **57** 2113 (1998); Diego A.R. Dalvit and F. D. Mazzitelli, Phys. Rev. A **59**, 3049 (1999).
[5]M.Crocce, D.A.R. Dalvit, and F.D. Mazzitelli, Phys. Rev. A **64**, 013808 (2001); Martin Crocce, Diego A.R. Dalvit, and F. D. Mazzitelli. Phys. Rev. A **66**, 033811 (2002).
[6] F. C. Lombardo, F.D. Mazzitelli, A. Soba, and P. I. Villar, Phys. Rev. A **93**, 032501 (2016); F.C. Lombardo, F.D. Mazzitelli, A. Soba and Paula I.Villar, Phys. Rev. A **98**, 022512 (2018).

Estados historia y caminatas aleatorias cuánticas

• Fernando Lomoc,[1] Norma Canosa,[1] Raul Rossignoli,[1,2] Alan Boette[1]

[1] *Departamento de Física e Instituto de Física La Plata (IFLP, CCT La Plata, CONICET-UNLP), Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, CC 67, 1900 La Plata, Argentina*
[2] *Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires*

Se examinan en el marco del formalismo de estados historia, el cual proporciona un tratamiento cuántico del tiempo, las caminatas aleatorias cuánticas en una dimensión. Se analiza el entrelazamiento sistema-tiempo, el cual es una medida del número de estados ortogonales visitados por el sistema durante su evolución, y se muestra que para una amplia clase de caminatas tipo Hadamard este entrelazamiento resulta independiente de la orientación inicial del espin, resultando posibles expresiones analíticas. Se examina también su relación con el entrelazamiento del operador que genera la evolución. Se discuten algunos ejemplos ilustrativos.

Efectos no lineales en la dinámica de dos modos armónicos cuánticos acoplados

• Norma Canosa,[1] Raúl Rossignoli,[1,2] Javier García,[3] Swapan Mandal[4]

[1] *Instituto de Física de La Plata, Dpto. de Física, FCE - UNLP*
[2] *Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires*
[3] *Instituto de Física La Plata – IFLP, CONICET-CCT La Plata, (1900) La Plata, Argentina*
[4] *Department of Physics, Visva-Bharati, Santiniketan-7125, India*

Se investigan efectos no lineales debido a términos anarmónicos tipo Kerr en la dinámica del entrelazamiento y otros observables cuánticos en un sistema de dos modos armónicos acoplados por momento angular. La presencia de estos términos tiene un efecto significativo en la dinámica del sistema para estados iniciales coherentes. Se examina el desarrollo y evolución del entrelazamiento, la no Gaussianidad, el número de fotones, etc, y se muestra que los términos anarmónicos, aún siendo débiles, pueden dar lugar a un aumento notable del entrelazamiento generado entre los modos y a su estabilización. Este efecto es más marcado cuando las poblaciones iniciales de los modos no son demasiado pequeñas. Surgen también efectos no gaussianos apreciables en la evolución de los estados, así como cambios en la población promedio de cada modo, que pasa de un régimen inicial transitorio a un regimen estacionario. Estos resultados muestran que la inclusión de términos no lineales puede dar lugar a cambios sustanciales en el entrelazamiento y en la dinámica del sistema.

Estudio de mecanismos de fragmentación en erupciones volcánicas mediante el análisis morfológico de cenizas por microscopía holográfica y estadística multivariada

• Joaquín Ignacio Díaz,[1] Andrea Carolina Monaldi,[1,2,3] María Florencia Martínez,[1,2,3] Walter Ariel Báez[4]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas - Universidad Nacional de Salta*
[2] *CONICET*
[3] *Grupo de Óptica Láser, Instituto de Investigaciones en Energía No Convencional*
[4] *IBIGEO UNSa-CONICET*

En vulcanología, la información morfológica y de tamaño de grano de las cenizas volcánicas ha sido considerada un reflejo de los mecanismos de fragmentación que operan durante una erupción. Así, los análisis morfológicos proveen una herramienta valiosa para descifrar los mecanismos responsables de la formación de cenizas. En particular, durante un evento eruptivo puede o no existir interacción del magma con agua externa; en el primer caso se dice que la fragmentación es de tipo hidromagmática, mientras que en el segundo de tipo magmática. En un trabajo reciente [1], se estudió la potencialidad de la microscopía holográfica para la caracterización morfológica de cenizas volcánicas. Los descriptores morfológicos y de tamaño de grano fueron obtenidos de las imágenes de fase de los hologramas de las cenizas. Mediante técnicas de procesamiento digital de imágenes fue posible caracterizar aspectos morfológicos de las distintas muestras e incorporar información tridimensional, inaccesible mediante microscopía convencional. Los resultados, sin embargo, mostraron la necesidad de profundizar en esta línea con el fin de echar luz en la relación entre la forma de las cenizas y la interacción agua-magma durante un evento eruptivo. Por este motivo, en este trabajo se analizan mediante microscopía holográfica nuevas muestras de interés geológico y se incorporan nuevos descriptores texturales útiles para la caracterización. Con el fin de facilitar la interpretación geólogica y representar de manera optimizada la variabilidad de los datos, se realiza un análisis de componentes principales para establecer probables dominios asociados a fragmentación magmática/hidromagmática.

Referencias:

[1] Martínez M. F. *et al.*, ANALES AFA **31**, 23 (2020).

Estudio del efecto de la turbulencia atmosférica en la dinámica de vórtices ópticos en imágenes

• Damián Gulich,[1,2] Nelly L. Cap,[1] Myrian Tebaldi[1,2]

[1] *Centro de Investigaciones Ópticas (CIOp - CONICET - UNLP - CICPBA)*
[2] *Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata*

En este trabajo estudiamos el efecto de la turbulencia atmosférica en la dinámica de vórtices ópticos detectados con la transformada de Laguerre-Gauss en condiciones de propagación de imágenes. Estudiando la varianza de las posiciones encontramos que para el bailoteo de los vórtices ésta es aproximadamente proporcional a la intensidad de la turbulencia, siguiendo un comportamiento análogo al previamente observado por el grupo para el caso del wandering de un haz láser. Para las experiencias se empleó un *turbulador*, que es un generador de turbulencias estadísticamente repetible basado en la mezcla de dos flujos de aire a diferentes temperaturas y permite estudiar en laboratorio la propagación de luz a través turbulencias atmosféricas.

Respuesta Óptica de Compuestos Nanoestructurados: Efecto de la Curvatura en Transmisiones Extraordinarias

• Leandro Missoni,[1] Guillermo Ortiz,[2] María Luz Martínez Ricci[1]

[1] *Ins. de Química Física de los Materiales, Medio Ambiente y Energía, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires*
[2] *Departamento de Física - Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura - Universidad Nacional del Nordeste*

En los supercristales plasmónicos, los bloques de construcción de las conocidas estructuras cristalinas se reemplazan por oligómeros de nanopartículas. Estos han adquirido relevancia en los últimos años debido a los particulares acoplamientos plasmónicos que se generan entre los nanoobjetos que la constituyen. Cada uno de estos elementos presenta propiedades ópticas que resultan fundamentales a la hora de comprender la sinergia en la respuesta global del sistema y que permiten abordar el diseño de nanocompósitos con propiedades electromagnéticas nuevas con funcionalidades específicas. El problema de los acoplamientos plasmónicos puede abordarse en términos de las resonancias ópticas de cada uno de los nanoobjetos que componen el supercristal. El modelado de sistemas que presentan bordes o esquinas agudas en sus componentes es un desafío debido a la singularidad de la respuesta electromagnética que en esas regiones dan lugar a localizaciones del campo microscópico. Sin embargo, desde el punto de vista experimental las esquinas se presentan típicamente redondeadas constituyendo el radio de curvatura, un importante parámetro de diseño de estructuras de supercristales realistas. En este trabajo, se propone analizar en forma sistemática el rol de la curvatura en los espectros de absorción de nanopartículas metálicas cuya morfología se encuentra descripta por la ecuación implícita:

$$\left|\frac{x}{a}\right|^p + \left|\frac{y}{b}\right|^p + \left|\frac{z}{c}\right|^p = 1 \qquad (1)$$

en la cual el índice p permite regular la curvatura de la nanopartícula. Variando este índice hemos estudiado en forma continua el pasaje entre secciones circulares a cuadradas para casos de simetría 2D o de esferas a cubos para sistemas 3D. En cualquiera de los casos, desde el punto de vista de la simulación, se observa que una correcta descripción de estas curvaturas da lugar a un alto requerimiento de cómputo debido a la necesidad de una alta discretización de la morfología. En todas las simulaciones efectuadas, se utilizó el paquete de acceso libre *Photonic*. Se observa que el parámetro de curvatura da lugar a una sintonización fina de las resonancias plasmónicas, ya que el grado de curvatura modifica considerablemente las posiciones resonantes. Esto permite explicar diferencias entre espectros experimentales presentes en la bibliografía, así como da lugar al diseño de estructuras más complejas tales como supercristales. Finalmente, abordamos la posible aplicación de supercristales con distintas curvaturas para la sintonización de la transmisión óptica en sistemas conductores.

Diseño de sensores basados en propiedades de interfaces ópticas uniaxial-isótropo en Reflexión Total Interna para la detección de ultrasonido

• Germán Eduardo Caro,[1] Eduardo Omar Acosta,[2] Liliana Inés Perez,[2,3] Francisco Ezequiel Veiras[2,4]

[1] *Universidad de Buenos Aires. . Facultad de Ingeniería. Departamento de Física. Grupo de Láser, Óptica de Materiales y Aplicaciones Electromagnéticas. Paseo Colón 85, C163ACV Buenos Aires, Argentina.*
[2] *Grupo de Láser, Óptica de Materiales y Aplicaciones Electromagnéticas, Departamento de Física, Facultad de Ingeniería - Universidad de Buenos Aires*
[3] *Instituto de Tecnologías y Ciencias de la Ingeniería, CONICET-UBA*
[4] *Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas*

En este trabajo estudiamos la reflexión de un haz láser en una interfaz prisma uniaxial - agua para la detección óptica de ultrasonido. El sistema de estudio cuenta con un prisma uniaxial, donde una de sus caras está en contacto con agua. En el agua hay una onda de presión que produce una variación del índice de refracción. Un haz se incide y se refleja en la interfaz prisma-agua, permitiendo sensar estas variaciones del índice de refracción midiendo los cambios en la reflectividad. Esta configuración es particularmente sensible cuando la incidencia es cercana y menor al ángulo de reflexión total interna. Por otra parte si el ángulo es mayor a este, las variaciones del índice de refracción del agua pueden medirse mediante los cambios en la fase del haz reflejado. En trabajos previos analizamos los coeficientes de reflexión y transmisión en interfaces isótropo-uniaxial y uniaxial-isótropo en planos principales, así como los ángulos formados por cada rayo. Con estas expresiones estudiamos la posibilidad de utilizar prismas compuestos de un material uniaxial. Comparamos la sensibilidad de cada uno en función del índice de refracción del agua y del ángulo de incidencia al prisma cuando la incidencia es cercana a la de reflexión total interna. Obtuvimos resultados con mayor sensibilidad que las ya estudiadas con prismas isótropos.

Verificación experimental de la optimización de moduladores espaciales de luz de doble pasaje basados en pantallas LCD twisted nematic

• Sebastián Bordakevich,[1,2] Lorena Rebón,[3,4] Silvia Ledesma[1,2]

[1] *Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas*
[2] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*
[3] *Instituto de Física de La Plata, CONICET*
[4] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata*

Las pantallas de cristal líquido de tecnología*twisted nematic*son ampliamente utilizadas para modular distintas propiedades de la luz; son elegidas, principalmente, por su bajocosto y accesibilidad. Sin embargo, por ser fabricadas para dispositivos de consumo masivo y usos varios, la modulación que es posible alcanzar con las mismas puede no ser óptima: por ejemplo, en términos de su rango y de su precisión. En un trabajo previo hemos estudiado, numéricamente,diseños experimentales de doble pasaje para modulación espacial óptima de polarización o de amplitud compleja del campo electromagnético. Se obtuvieron modulaciones complejas que no son posibles de obtener con un único modulador. En este trabajo se verificaron experimentalmente algunos casos particulares que resultan interesantes para distintas aplicaciones. En estos casos se obtuvieron resultados que coinciden con los predichos por las simulaciones con una exactitud del orden del 5%.

Absorción de luz incrementada en nanoestructuras metal plasmónico-magnetita

• Rocío González Ochea,[1] Ezequiel Encina[1]

[1] *INFIQC (CONICET), Dpto. de Fisicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba. Ciudad Universitaria. 5000 Córdoba. Argentina.*

El diseño y la preparación de estructuras capaces de convertir de manera eficiente la energía solar en energía química o eléctrica son claves para la sostenibilidad ambiental y constituyen un gran desafío actual. En este sentido, las nanoestructuras híbridas compuestas por metales plasmónicos y óxidos semiconductores (NHs) han mostrado un rendimiento satisfactorio para desempeñar este papel. Las propiedades de captación de luz de NHs de diversa composición, tamaño y forma han sido investigadas tanto experimental como teóricamente. [1] Los metales plasmónicos más empleados son Au y Ag, siendo TiO_2, ZnO, Cu_2O, α-Fe_2O_3 los óxidos semiconductores más utilizados. La absorción de luz incrementada en estas NHs y, en consecuencia, la mayor generación de portadores de carga en el componente semiconductor, se ha atribuido a tres mecanismos principales diferentes: captura de luz, inyección de electrones calientes y transferencia de energía de resonancia inducida por plasmón (PIRET). [2]

En este trabajo, se estudiaron las propiedades de captación de luz de NHs esféricas del tipo núcleo-coraza mediante simulaciones electrodinámicas aplicando la aproximación de dipolos discretos. [3] El núcleo de las NHs está compuesto por un metal (Ag, Au, Al) mientras que la coraza concéntrica por el óxido de hierro magnetita (Fe_3O_4). El valor del diámetro del núcleo metálico D se varió sistemáticamente en el intervalo 10-90 nm, mientras que el espesor de la coraza E en el intervalo 20-80 nm. Los espectros de extinción, absorción y dispersión fueron calculados para longitudes de onda comprendidas entre 400-900 nm.

La metodología implementada permitió examinar la contribución de cada componente de la NH a la eficiencia de absorción, Qabs, por separado. Sobre la base de los valores de Qabs, fue posible calcular el flujo de fotones absorbidos dentro del componente Fe_3O_4, Φ, una cantidad relevante que determina en gran medida la eficiencia de la fotoconversión en los fotocatalizadores. En general, se encontró que el mayor flujo de fotones absorbidos en la coraza de Fe_3O_4 ocurre cuando $\frac{D}{E} = 4$, independientemente de la naturaleza del núcleo metálico. Además, Φ alcanza los mayores y menores valores cuando el núcleo está compuesto por Ag y Al, respectivamente.

Referencias:

[1] X. C. Ma *et al.*, Light Sci. Appl. **5**, e16017 (2016). DOI
[2] SK Cushing and N Wu J. Phys. Chem. Lett. **7**, 666 (2016).
[3] BT Draine and PJ Flatau J. Opt. Soc. Am. A **11**, 1491 (1994).

Espectroscopía atómica de Rb en RF a partir del batido de dos láseres NIR

• Maria del Pilar Campos Marino,[1] Marcelo Luda,[2] Jorge Codnia[2]

[1] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*
[2] *Departamento de Investigaciones en Láseres y Aplicaciones (CITEDEF) - UNIDEF - CONICET*

En este trabajo presentamos el relevamiento de la espectroscopia hiperfina de Rubidio en un entorno de la transición D1, mediante el batido de dos señales ópticas emitidas por dos láseres en el infrarrojo cercano (NIR). Para realizar esto desarrollamos un sistema láser sintonizable en la región de 795 nm utilizando un diodo láser VCSEL que fue estabilizado en corriente y temperatura. Caracterizamos la intensidad de emisión del láser midiendo la potencia de salida en función de la corriente y midiendo también el tamaño del haz. A su vez se caracterizó la frecuencia de emisión en función de la corriente y de la temperatura. Luego variando la corriente se relevó el espectro de absorción de Rubidio en la transición D1. Utilizando lógica programable FPGA y software desarrollados en el laboratorio, se consiguió amarrar el láser a una de las 4 posibles transiciones hiperfinas del isótopo ^{87}Rb en la región D1. Estudiamos la estabilidad del amarre a partir del análisis de la varianza de Allan. Finalmente, haciendo uso de otro láser de características similares que también se encontraba amarrado a otra de las transiciones hiperfinas, se determinó la diferencia de energía entre ambas transiciones (810 MHz) midiendo la variación temporal del interferograma generado por la superposición de ambos láseres sobre un fotodiodo de avalancha. Esta señal, asociada con el batido de las frecuencias ópticas de cada láser se analizó con un analizador de espectros. A su vez, esto se comparó también con el espectro óptico obtenido con la superposición de ambos láseres en una cavidad Fabry Perot.

Vías intracelulares de difusión de la proteína de cápside del virus del dengue visualizadas por espectroscopías de correlación

• Alexis Luszczak[1]

[1] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*

En este trabajo se estudiaron aspectos dinámicos funcionales de una proteína central durante el proceso de infección por los virus del dengue y Zika. La proteína de cápside es una proteína viral multifuncional que tiene el rol de reclutar al genoma durante la formación de nuevas partículas virales, pero también tiene la función de liberar al genoma viral durante una nueva infección. Estos dos roles, la encapsidación y el desnudamiento del genoma, son procesos esenciales para la propagación del virus; sin embargo, para dengue como para otros flavivirus sus mecanismos son poco conocidos. Con este objetivo, en este trabajo se buscó profundizar en la compresión de algunos de los procesos de cápside durante el ciclo de replicación de los virus del dengue y del Zika. Especial énfasis se puso en el estudio de la localización y los mecanismos de difusión con resolución subcelular en células infectadas. Para alcanzar estos objetivos se combinaron simulaciones numéricas, y métodos avanzados de análisis de imágenes basados en técnicas de espectroscopía de correlación de fluorescencia realizados sobre experimentos de microscopía confocal. Debido a que la proteína de cápside es esencial para la propagación de los virus del dengue y Zika, esperamos que los resultados obtenidos en este trabajo aporten a determinar funciones de la proteína de cápside que permitan planear nuevos enfoques en el desarrollo de estrategias antivirales.

Estudio de la sensibilidad de detección de fotones correlacionados con Skipper-CCDs

• Muriel Bonetto,[1] Magnoni Agustina G.,[1,2] Darío Rodrigues[1,3]

[1] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*
[2] *Laboratorio de Óptica Cuántica, CEILAP (UNIDEF, CITEDEF-CONICET). Buenos Aires, Argentina.*
[3] *Instituto de Física de Buenos Aires, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales CONICET- Universidad de Buenos Aires*

Presentamos los resultados del estudio cuantitativo de la sensibilidad alcanzable en la detección de fotones correlacionados generados por el proceso de Conversión Espontánea Paramétrica Descendente (SPDC, por sus siglas en inglés) utilizando la novedosa tecnología Skipper-CCD y sus posibles aplicaciones para mediciones de absorbancia de muestras. Usando una simulación del experimento diseñamos una versión optimizada del sistema y estudiamos el desempeño de los estimadores de absorbancia usuales en el régimen de baja intensidad si se cuenta con un detector que puede resolver fotones de forma individual y en un rango dinámico desde cero hasta 2000 fotones/electrones. Este es el caso de la tecnología Skipper-CCD que también describimos en este trabajo.

Diseño de nanoestructuras de GaP para aplicaciones en fotónica no-lineal y espectroscopías

• Gianni Q. Moretti,[1] Andrea V. Bragas,[1] Gustavo Grinblat[1]

[1] *Depto. Física, FCEyN (UBA) - IFIBA - CONICET*

Las resonancias de estados cuasi-ligados en el continuo (Q-BICs) han sido demostradas recientemente en materiales dieléctricos nanoestructurados para longitudes de onda de la luz[1]. Se caracterizan por tener elevados factores de calidad y altas intensificaciones del campo eléctrico local[2], lo que las hace atractivas para estudiar procesos ópticos no-lineales[3] y como amplificadores para técnicas de espectroscopia[4], entre otras aplicaciones.

En este trabajo se diseña numéricamente un arreglo periódico de cilindros elípticos hecho en fosfuro de galio (GaP) capaz de soportar tres resonancias Q-BIC separadas espectralmente. Se exploran las capacidades del sistema para generación de segunda armónica y mezcla degenerada de cuatro ondas, obteniendo eficiencias por celda unidad del orden de 2 W^{-1} y 60 W^{-2}, respectivamente. Comparativamente, se muestra cómo este tipo de estructuras supera por más de 4 ordenes de magnitud la respuesta no-lineal que se obtiene con resonancias de tipo Mie o anapolar en resonadores individuales de GaP.

Aprovechando la distribución particular del campo eléctrico en el sistema presentado se diseña una nanocavidad para aplicaciones espectroscópicas abriendo una ranura en la estructura. Se muestra cómo la nano-cavidad óptica presenta alta intensidad de campo eléctrico distribuido homogéneamente en la misma. Esto es aprovechado para obtener elevadas amplificaciones radiativas de dipolos eléctricos puntuales colocados en el centro de la nano-cavidad.

Referencias:

[1] Z. Liu, Y. Xu, Y. Lin *et al.*, Phys. Rev. Lett. **123**, 253901 (2019).
[2] C. W. Hsu, B. Zhen, A. D. Stone, *et al.*, Nat. Rev. Mater. **1**, 16048 (2016).
[3] A. P. Anthur, H. Zhang, R. Paniagua-Dominguez *et al.*, Nano Lett. **20**, 8745 (2020).
[4] Y. Jahani, E. R. Arvelo, F. Yesilkoy *et al.*, Nat. Commun. **12**, 3246 (2021).

Mejora en la detección de elementos en aguas residuales por medio de la técnica Laser-Induced Breakdown Spectroscopy

• María Paz Bayala,[1,2,3] Cristian Adrian D' Angelo[1,2,3]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas - Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires*
[2] *CIFICEN (UNCPBA-CICPBA-CONICET), Pinto 399, 7000 Tandil, Argentina*
[3] *Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires, Calle 526 entre 10 y 11, 1900 La Plata, Argentina*

En este trabajo se analizaron las mejores condiciones para el análisis de muestras líquidas provenientes de lixiviados de relleno sanitarios por medio de la técnica de espectroscopia de plasmas producidos por láser (LIBS), la cual presenta un diagnóstico sencillo y de bajo costo que permite realizar análisis cuantitativos y cualitativos en muestras líquidas, sólidas y gaseosas. Para el análisis se tomaron muestras del relleno sanitario de la ciudad de Olavarría y con ellas se elaboraron dos tipos de muestras con el fin de encapsular los elementos presentes en el lixiviado. Por un lado se utilizó 6 g de CaO en el cual se añadió 6 ml de lixiviado y se los dejo secar a 60 °C durante una hora, este proceso se replicó 3 veces llegando a un volumen final de 18 ml, luego la mezcla homogénea se llevó a una prensa con una presión de 138 MPa, formando una pastilla compacta. Por otro lado, se utilizó papel absorbente (secante) con un área de 12 cm2 en donde se añadieron 0,25 ml lixiviado en forma de gotas lo cual llegó a cubrir por completo el papel, se dejó secar en un horno a 60 °C durante una hora y luego se repitió este proceso 3 veces llegando a 0,75 ml. Para contrastar los resultados de estas muestras se utilizó como blanco una muestra de agua destilada para cada uno de los formatos. Los espectros de emisión obtenidos, se analizaron desde los 260 nm hasta 465 nm, por medio de un equipo compacto sin discriminación temporal con un láser Nd: YAG Q-switched pulsado (Laser Big Sky, Model Ultra, Laser Technologies, Inc., USA), que opera en la longitud de onda fundamental de 1064 nm, a 10 pulsos/s y un ancho de pulso de 7 ns. La energía de cada pulso a mínima potencia es de 5 mJ y las muestras se colocaron en un soporte rotativo para evitar cráteres por ablación. Del análisis se dedujo que la mejor forma para realizar las mediciones en este tipo de efluentes es por medio del papel absorbente, en donde se observa que las líneas presente en los espectros son netamente del efluente. Por el contrario, en las muestras con CaO, en la región analizada, las líneas de Ca dificultan la detección de los elementos presentes en el lixiviado. Además, se observó que no existen cambios sustanciales respecto a las intensidades de las líneas halladas, tanto para el papel como para las pastillas con CaO.

Determinación de la longitud de onda central en fuentes de luz con espectros de forma arbitraria para su aplicación en microscopía de fase para tomografía óptica coherente

• José María Folgueiras,[1] Eneas N. Morel,[1] Jorge R. Torga[1]

[1] *Grupo de Fotonica Aplicada, Facultad Regional Delta, Universidad Tecnológica Nacional*

La tomografía óptica coherente sensible a la fase (PhS-OCT), también conocida como microscopía de fase (SDPM), es una técnica que se basa en la medición de la fase en la señal de interferencia obtenida por tomografía óptica coherente (OCT). Es utilizada mayormente para seguir movimientos o deformaciones de un punto fijo en la superficie o en el interior de un material cuando éste es sometido a una perturbación externa. Para esto se toman imágenes sucesivas de la tomografía de la muestra (A-scans) y se ve la evolución de la fase. Para la determinación de la fase un aspecto determinante es conocer la longitud de onda central del espectro de la fuente de luz. En el caso de que la fuente tenga un perfil simétrico este valor está bien determinado, pero en un caso general su determinación es un problema a resolver. En este trabajo se propone un método para poder determinar este valor con perfiles de láser de forma arbitraria, junto con un procedimiento para la determinación de la OPD en aplicaciones de topografía y tomografía.

Análisis temporal y espectral de plasma LIBS en aleación Cu-Sn bajo la influencia de un campo electrostático

• Cristian Falagan,[1] Cristian Adrian D39,[2] Angelo[1,3,4]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas - Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires*
[3] *Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires, Calle 526 entre 0 y , 900 La Plata, Argentina*
[4] *CIFICEN (UNCPBA-CICPBA-CONICET), Pinto 399, 7000 Tandil, Argentina*

El presente trabajo tiene como objetivo analizar la influencia de campos electrostáticos en las líneas de emisión de un plasma LIBS, observando la evolución temporal y los perfiles de las líneas espectrales. La espectroscopia de plasma inducida por láser, mejor conocida como LIBS (Laser Induced Breakdown Spectroscpy) es una técnica experimental de la espectroscopia, basada en la inducción de transiciones atómicas en un elemento, mediante un pulso láser de alta potencia. Este proceso genera una ablación microscópica en la muestra, logrando formar un pequeño plasma, el cual funciona como fuente de emisión espectroscópica. Mediante una configuración experimental tradicional, se logra capturar y difractar la luz emitida y de esta forma obtener el espectro de emisión requerido.La muestra utilizada es una pequeña pieza de bronce montada sobre una varilla de acrílico y dispuesta entre dos placas de cobre separadas a 22,5 mm, ambas conectadas a una fuente de alta tensión (0kV-10kV). El plasma es generado por un láser Nd:YAG con longitud de onda fundamental de 1.06 m y pulsos de aproximadamente 100 mJ a una frecuencia de 2 Hz. La luz es captada por un monocromador Jobin Yvon THR 1500, para luego ser transformada en señal eléctrica por un fotomultiplicador y finalmente ser procesada por un Boxcar Standford Research System, el cual nos permite establecer los parámetros necesarios de medición. De esta forma se obtiene tanto el espectro de emisión como también la evolución temporal de determinadas líneas de emisión. El plasma es caracterizado a partir del análisis espectral, con líneas de determinadas longitudes de onda, estableciendo por diferentes métodos, la densidad electrónica y la temperatura del mismo. Rodeando al plasma en un campo electrostático, se observaron cambios en ambos parámetros como también una mejora en la intensidad de la línea espectral LIBS es una técnica aplicable a cualquier material, independientemente del estado de agregación del mismo, como también no es necesario realizar ningún tipo de proceso previo sobre la muestra. Sin embargo, la baja intensidad en las líneas de emisión de ciertos elementos hace que algunos de ellos sean difíciles de identificar. Poder definir mejor los espectros de emisión es fundamental en LIBS, por lo tanto es muy importante obtener arreglos experimentales que nos permitan mejorar esta técnica.

Fabricación de capas de silicio poroso con perfil de porosidad uniforme monitoreado mediante tomografía de imbibición capilar

• Luisina Forzani,[1] Marcelo Sallese,[2] Nicolas Budini,[2,3] Raul Urteaga[2,3]

[1] *Centro de Investigación de Métodos Computacionales*
[2] *Instituto de Física de Santa Fe - IFIS - CONICET*
[3] *Facultad de Ingeniería Química - Universidad Nacional del Litoral*

El silicio poroso (SP) fabricado por anodizado electroquímico a partir de una oblea de silicio es un material que presenta un gran interés en la comunidad científica ya que permite construir cristales fotonicos o fonónicos porosos. En general, su uso se ha restringido a capas con espesores relativamente pequeños donde la porosidad a lo largo de la capa resulta aproximadamente constante y su valor depende sólo de la corriente utilizada durante el anodizado. Sin embargo, recientemente se han propuesto aplicaciones que requieren espesores mayores y en ese caso comienza a evidenciarse una variación de la porosidad en profundidad que limita en general el funcionamiento de los dispositivos. En este trabajo estudiamos el perfil de porosidad generado en capas de SP para diferentes corrientes de fabricación mediante una técnica de caracterización basada en la imbibición capilar de la estructura. Mediante una técnica interferométrica se monitorea el cambio de espesor óptico de la capa porosa mientras se llena capilarmente con un fluido simple. A partir de la dinámica de llenado en ambas direcciones de la capa porosa y un modelo fluidodinámico apropiado, es posible obtener el perfil de porosidades de la estructura. En este trabajo se propone además una corrección a la corriente aplicada que permite obtener muestras gruesas de porosidad uniforme. Esto abre, entre otras cosas, la posibilidad de fabricar cristales fotónicos y fonónicos de capas gruesas que trabajen en un mayor rango de frecuencias.

Explorando técnicas de imágenes de actividad speckle como evaluación diagnóstica de patologías en tejidos biológicos, aplicaciones

• Florencia Daniela Choque,[1] Gladis Graciela Romero,[1,2] Gustavo Jonatan Curkovic[1]

[1] *Grupo de Óptica Láser, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de Salta-CONICET*
[2] *Instituto de Investigación en Energías No Convencionales, CONICET-UN de Salta*

Se presenta un estudio sobre el funcionamiento de técnicas de biospeckle para el estudio de actividad biológica en tejidos y un estudio comparativo de los métodos más utilizados para el análisis y extracción de la información contenida en patrones de biospeckle. Se busca aplicar estas técnicas a la monitorización de la actividad y probar los métodos de análisis para la interpretación de resultados in situ. Se investigan tejidos compuestos por células vegetales y animales, logrando la detección de regiones de distinta actividad en muestras de distinta naturaleza, espesor y porosidad. Se procura reconocer mapas de vascularización en hojas, crecimiento de hongos sobre superficies, actividad en flores y analizar irregularidades en piel humana, realizando de esta manera una exploración de la aplicabilidad de los métodos sobre tejidos de complejidad creciente. Por último, se evalúa la potencialidad del biospeckle como herramienta para el diagnóstico no invasivo de anomalías a la vez que se señalan los mejores métodos de análisis para cada tipo de tejido en base a criterios obtenidos del análisis experimental realizado en el marco de este trabajo.

Optimización de un detector heterodino para interferometría de baja coherencia

• Leslie Judith Cusato,[1,2] Jorge Román Torga,[1,2] Eneas Nicolás Morel[1,2]

[1] *Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas*
[2] *Grupo de Fotonica Aplicada, Facultad Regional Delta, Universidad Tecnológica Nacional*

La tomografía de coherencia óptica (optical coherence tomography, OCT), ampliamente conocida en el ambiente de la biomedicina se basa en la interferometría de baja coherencia (LCI) para realizar imágenes de alta resolución en dos o tres dimensiones. Desde las últimas décadas existe un creciente interés por incorporar esta técnica en el ambiente industrial. La principal limitación de los sistemas convencionales en el dominio de Fourier (FD-LCI) es el rango de medición axial acotado a 3 mm o 4 mm. Si bien es posible extender este rango utilizando fuentes sintonizables para la técnica de swept-source (SS-LCI), el costo del equipo aumenta drásticamente, lo cual no lo hace adecuado para cierto tipo de aplicaciones industriales. La implementación de un detector heterodino para las señales interferométricas de FD-LCI permite extender el rango de medición, alcanzando valores por lo menos un orden de magnitud mayores. El dispositivo consiste en un arreglo de tipo interferómetro de Michelson de redes de difracción, ubicadas a un determinado ángulo de Littrow. Una de las principales características de la configuración que permiten la extensión del rango, es la expansión del haz a la entrada del detector. En este trabajo se caracterizó el rango dinámico del detector y la resolución de la técnica teniendo en cuenta el tamaño del haz utilizado y su perfil de intensidad. Las simulaciones realizadas permiten optimizar los parámetros ý la configuración necesarios para obtener un desempeño adecuado a la aplicación que se requiera.

Oscilaciones de Josephson en junturas de líquidos cuánticos de luz

• Ignacio Carraro Haddad,[1,2] Dimitri Chafatinos,[1,2,3] Franco Mangussi,[2,3] Gonzalo Usaj,[2,3] Axel Bruchhausen,[1,2,3] Alexander Kuznetsov,[4] Klaus Biermann,[4] Paulo Santos,[4] Alejandro Fainstein[1,2,3]

[1] *Laboratorio de Fotónica y Optoelectrónica, Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro, Bariloche, Río Negro, Argentina*
[2] *Instituto Balseiro - Universidad Nacional de Cuyo*
[3] *Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (CNEA-CONICET)*
[4] *Paul-Drude-Institut für Festkörperelektronik, Leibniz-Institut im Forschungsverbund Berlin e.V., Hausvogteiplatz*

Los polaritones de microcavidades son un sistema modelo para el estudio de fenómenos cuánticos de condensados de bosones fuera de equilibrio. Corresponden a cuasipartículas que surgen del acoplamiento fuerte entre excitones confinados en pozos cuánticos y el modo óptico en microcavidades. Por su característica combinada de luz-materia, los polaritones presentan propiedades peculiares que se han definido como de líquidos de luz: interactúan eficientemente entre ellos y con el entorno via su parte excitónica, mientras que la parte fotónica permite un acoplamiento eficiente con los modos ópticos del espacio exterior. Condensados de estos polaritones pueden lograrse en trampas cero-dimensionales, o en arreglos de estas trampas de geometrías controladas. En este trabajo estudiaremos de manera experimental y teórica los estados colectivos en moléculas consistentes en junturas tipo Josephson de pares de trampas cuadradas de tamaño micrométrico. Dependiendo de la potencia y forma de excitación óptica observamos tanto estados acoplados correspondientes a oscilaciones de Josephson, como el auto-atrapamiento inducido por correlaciones. La observación de líneas adicionales se interpreta como evidencia de estados biestables asociados a desdoblamientos tipo spin-órbita de los polaritones en trampas confinadas. Efectos novedosos optomecánicos se esperan cuando las oscilaciones de Josephson y/o estas biestabilidades se sintonizan con modos vibracionales confinados en estas estructuras [1].

Referencias:

[1] D. L. Chafatinos, A. S. Kuznetsov, S. Anguiano, A. E. Bruchhausen, A. A. Reynoso, K. Biermann, P. V. Santos and A. Fainstein. *Polariton-driven phonon laser*, Nat. Commun. **11**, 4552 (2020).

Simulaciones numéricas de nanoantenas ópticas para la construcción de fuentes eficientes de fotones individuales

• Gabriel Paciaroni,[1] Lorena Rebón,[2] María Gabriela Capeluto[1]

[1] *Depto. Física, FCEyN (UBA) - IFIBA - CONICET*
[2] *Instituto de Física de La Plata, Departamento de Física, CONICET, Universidad Nacional de La Plata, Argentina*

El uso de sistemas cuánticos para la codificación, manipulación y transmisión de información permite realizar ciertas tareas computacionales de forma mucho más eficiente y segura que mediante su contraparte clásica. La utilización de fotones como portadores de información resulta la elección ideal para aplicaciones de comunicaciones cuánticas, debido a su alta velocidad de transmisión y baja interacción con el entorno, lo que les permite viajar largas distancias siendo poco afectados por un medio ruidoso. Además, pueden ser manipulados mediante tecnología estándar, a temperatura ambiente, e integrados a las redes de transmisión óptica existentes. Estas aplicaciones requieren de fuentes capaces de emitir fotones individuales de modo eficiente y determinista [1], lo que representa uno de los desafíos experimentales a resolver. Las fuentes basadas en emisores cuánticos (como lo son los defectos en cristales) son candidatas prometedoras para la generación de fotones individuales a temperatura ambiente. Sin embargo, dado que la emisión espontánea no es direccional, la colección de fotones en los sistemas ópticos es poco eficiente. Una forma de mejorar la tasa de emisión, direccionalidad y polarización, es modificar el entorno electromagnético del emisor, mediante el uso de cavidades o antenas. En este trabajo se realizan simulaciones numéricas por el método de elementos finitos (FEM) para estudiar las propiedades ópticas de emisores, modelados como fuentes dipolares puntuales en longitudes de onda visibles, en presencia de nanoantenas metálicas de Au y Ag. Entre otras magnitudes, se calcula el incremento de la tasa de emisión para distintas geometrías de antena, en función de la longitud de onda. Se considera tanto la forma de la antena, como los tamaños característicos y la posición del emisor. Se modelan también las propiedades ópticas del ZnO, uno de los materiales candidatos a contener los defectos que se comportan como fuentes de fotones individuales [2]. Además, se comparan los resultados de las simulaciones al representar la fuente como un dipolo eléctrico o magnético. Mediante el cómputo de las diferentes contribuciones al vector de Poynting, y separando las contribuciones radiativas de las no radiativas, se cuantifica la eficiencia de las antenas [3], tanto para colectar el flujo de energía emitida por la fuente, como para reemitirlo al campo lejano.

Referencias:

[1] M. D. Eisaman, J. Fan, A. Migdall, and S. V. Polyakov. *Single-photon sources and detectors*, Rev. Sci. Inst. **82**, 071101 (2011).
[2] A. J. Morfa, B. C. Gibson, M. Karg, T. J. Karle, A. D. Greentree, P. Mulvaney, and S. Tomljenovic-Hanic. *Single-Photon Emission and Quantum Characterization of Zinc Oxide Defects*, Nano Lett. **12**, 949 (2012).
[3] K. C. Y. Huang, Y. C. Jun, M. K. Seo, and M. L. Brongersma. *Power flow from a dipole emitter near an optical antenna*, Opt. Express **19**, 19084 (2011).

Sintonización de la resonancia de plasmón superficial de nanopartículas de plata mediante síntesis química

• Cristian Villa Perez,[1,2] Florencia C. Urruchua,[3] Mariela A. Ferndández,[3] Jesica M. J. Santillán,[2] David Muñetón Arboleda,[2] Valeria B. Arce[1,2]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas - Universidad Nacional de La Plata*
[2] *Centro de Investigaciones Ópticas, CONICET La Plata - CIC-BA*
[3] *Centro de Tecnologías de Recursos Minerales y Cerámica, CONICET*

El interés en las nanopartículas de plata (AgNPs) ha crecido en forma continua en los últimos años, debido a la peculiaridad de sus propiedades físicas y químicas. Las AgNPs tienen importantes aplicaciones en muchas áreas científicas y tecnológicas. Estos materiales pueden ser sintetizados por diferentes métodos, entre los que se destacan aquellos en solución por su versatilidad y por la posibilidad de controlar el tamaño de partícula cambiando la proporción de reactivos.
Se sintetizaron nanopartículas de plata con banda de resonancia plasmónica entre 400 y 900 nm. La síntesis realizada permite sintonizar la posición del máximo del plasmón. Brevemente, la síntesis consiste en generar inicialmente semillas de plata (Ag-seed) a partir de soluciones acuosas de nitrato de plata ($AgNO_3$), polivinilpirrolidona (PVP), citrato trisódico ($Na_3C_6H_5O_7$) y borhidruro de sodio ($NaBH_4$), como precursor de Ag, estabilizantes y reductor, respectivamente. Luego, a partir de las semillas se realizó el crecimiento de las nanopartículas mediante el agregado de ácido ascórbico ($C_6H_8O_6$) y $AgNO_3$, luego se completa la estabilización superficial con citrato trisódico, de este modo es posible sintetizar los diferentes nanomateriales de plata. El tipo de nanopartículas obtenidas depende de la cantidad de Ag-seed agregadas inicialmente y de la velocidad de agregado de los reactivos.
Las suspensiones de AgNPs preparadas fueron caracterizadas por diversas técnicas, como espectroscopía FTIR, que permite el análisis de los grupos orgánicos superficiales; microscopía electrónica de barrido (SEM) para determinar el tamaño y la geometría de las nanopartículas. Como también medidas de potencial zeta, que permite conocer la carga superficial de las partículas en diferentes condiciones de pH y fuerza iónica, información que puede relacionarse con la estabilidad de las AgNPs. Las observaciones realizadas por microscopía SEM permiten confirmar el tamaño y la geometría de los materiales sintetizados.
Se realizó un estudio de estabilidad de las suspensiones preparadas, el mismo se logró analizando la posición del máximo y el ancho medio de los espectros de extinción obtenidos inmediatamente después de la preparación y luego de varias semanas. Por otro lado, se ha realizado el análisis teórico de los espectros de extinción de las suspensiones de las semillas de Ag. El ajuste teórico de los espectros experimentales de las suspensiones coloidales de plata se basa en Teoría de Mie, estos estudios permiten determinar el tamaño de las Ag-seed con muy buena estadística. Se ha encontrado que las semillas contenidas en las suspensiones presentan un radio modal de 1,6 nm y radio medio de 2,0 nm.

Desarrollo de un fotogoniómetro versátil utilizando una cámara CCD B/W

• Alexander Santucho Cainzo,[1,2] Diego Corregidor[1,2]

[1] *Departamento de Luminotecnia, Luz y Visión, Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología, Universidad Nacional de Tucumán*
[2] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología, CONICET-Universidad Nacional de Tucumán*

Para el desarrollo de sistemas de Iluminación y, en general, de la ciencia de la visión, es necesario poder caracterizar correctamente tanto la respuesta a la iluminación de las superficies y materiales, como la distribución de energía que generan fuentes luminosas que se ubican en el espacio. Esto llevó al desarrollo de 2 tipos sistemas: los que miden la reflectancia y la transmitancia (normal y difusas) de materiales, y los fotogoniómetros, instrumentos que miden la distribución de luz producida por una fuente. Ambos sistemas tienen como objetivo medir la distribución espacial de la luz, pero como históricamente el orden de magnitud de la energía y los tamaños de evaluación de las fuentes era mucho mayor, se observaba que los dispositivos fotogoniómetros eran instrumentos de muy diferente escala a los reflectómetros y escaterómetros. Con el desarrollo y la difusión del LED como base de sistemas de iluminación, los órdenes de magnitud de estas nuevas fuentes disminuyeron considerablemente, por lo que es posible desarrollar un sistema que permita tanto evaluar superficies como fuentes. En este trabajo se pone a prueba como fotogoniómetro de uso general a nuestro sistema, que originalmente fue desarrollado como escaterómetro goniométrico automático. El sistema original utiliza diferentes fuentes laser por lo que no es necesario conocer la respuesta en longitud de onda de la cámara CCD; sin embargo, nuestra nueva aplicación hace imprescindible conocer adecuadamente la respuesta en luminancias. Con ese fin, y sabiendo que cada cámara tiene diferentes respuestas, calibramos nuestra CCD utilizando un monitor LCD. Esto permitió modificar la luminancia media y medir la respuesta del CCD a cada valor de luminancia media para diferentes tiempos de exposición. Demostramos que la respuesta de nuestra CCD a la luminancia presenta 3 regímenes distinguibles según la respuesta de nivel de gris (NG) que mide la cámara: el primer régimen lineal de 0 a 120 de NG, el segundo cuadrático de 120 a 240 de NG, y el tercero asintótico para más de 240 de NG, para todos los tiempos de exposición que se midieron. Esto nos permite decir que, conocido el tiempo de exposición y para el valor de NG obtenido, estas mediciones se pueden considerar representativas de la luminancia siempre que la respuesta de NG sea menor a 240. Además, utilizando una caja isoluminante, verificamos el posible efecto de viñeteo, en el cual la iluminancia efectiva sobre las márgenes de la CCD es menor a la del centro, generando un patrón típico de bóveda, que puede precisar un algoritmo de corrección. Se pudo observar que si bien la respuesta del sistema la cámara-lente presenta viñeteo, al utilizar solo los píxeles centrales como área efectiva de medición, este efecto no es relevante, por lo que dentro de la región de medición un mismo valor de NG representa igual luminancia. Para poder evaluar el funcionamiento de nuestro fotogoniómetro se midieron las distribuciones de luz generadas por fuentes LED y se la compararon con las mediciones realizadas en un banco fotométrico manual, que utiliza un sensor de Iluminancias calibrado LMT.

Simulaciones numéricas FDTD en la nanoescala: fotónica y plasmónica a través de MEEP

• Valeria R. Pais,[1] Luciana P. Martínez,[2] Fernando D. Stefani[2]

[1] *Departamento de Fisica, FCEyN, UBA*
[2] *Centro de Investigaciones en Bionanociencias*

Las simulaciones numéricas son una herramienta necesaria y poderosa para hallar soluciones a las Ecuaciones de Maxwell en situaciones donde las soluciones analíticas no pueden obtenerse. Uno de los métodos más usados para ello, por su simplicidad y robustez, es el de Diferencias Finitas en Dominio Temporal (FDTD) [1]. Dentro de las muchas implementaciones existentes de este método, MEEP ha sido citada en más de 600 publicaciones en revistas científicas y ha sido descargada más de 54.000 veces [2]. Consiste en un paquete gratuito y de fuente abierta diseñado por el MIT que ofrece gran flexibilidad al usuario en Scheme y Python a través de una aplicación de SWIG a un algoritmo programado a bajo nivel en C++.
En este trabajo se utiliza la implementación en Python de este paquete FDTD para replicar la respuesta electromagnética de nano-estructuras. En particular, se muestra cómo emplear MEEP en la obtención de patrones de campo, espectros de absorción y dispersión, y patrones de emisión angular. Este tipo de cálculos son de utilidad para modelar los experimentos que se realizan en el Grupo de Nanofísica Aplicada del CIBION en áreas como, por ejemplo, impresión óptica de nanopartículas [3, 4], crecimiento controlado de nanopartículas a través de fotoquímica localizada [5], y microscopía de fluorescencia de super resolución [6, 7]. Como verificación de buen funcionamiento del código, se simularon patrones de campo y espectros de dispersión de nanopartículas plasmónicas esféricas, que luego se compararon contra espectros obtenidos mediante la aproximación dipolar y la teoría de Mie. Además, se simularon patrones angulares de emisión de moléculas fluorescentes, modeladas como pequeños dipolos.

Referencias:

[1] Taflove, A., and Hagness, S. *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*, *Artech House*, 3ra edición, (2005).
[2] Taflove, A., Oskooi, A., and Johnson, S.G. *Advances in FDTD Computational Electrodynamics: Photonics and Nanotechnology*, *Artech House*, (2013).
[3] Gargiulo, J *Impresión óptica de nanopartículas metálicas*, Tesis doctoral, FCEyN, UBA, (2017).
[4] Zaza, C. *et al.*, *Size-selective optical printing of silicon nanoparticles through their dipolar magnetic resonance*, ACS Photonics **6**, 815 (2019).
[5] Violi, I.L., Gargiulo, J. *et al.*, *Light-Induced Polarization-Directed Growth of Optically Printed Gold Nanoparticles*, Nano Lett. **16**, 6529 (2016).
[6] Masullo, LA. *et al.*, *Pulsed Interleaved MINFLUX*, Nano Lett. **21**, 840 (2020).
[7] Szalai, AM., Siarry, B., Lukin, J. *et al.*, *Three-dimensional total-internal reflection fluorescence nanoscopy with nanometric axial resolution by photometric localization of single molecules*, Nat. Commun. **12**, 517 (2021).

Análisis y modelado de un sistema para tomografía optoacústica basado en interferometría óptica heterodina

• Roberto Mariano Insabella,[1] Lucas Hirsch,[1] Martin German Gonzalez,[1,2] Guillermo Daniel Santiago[1]

[1] *Universidad de Buenos Aires. Facultad de Ingeniería. Departamento de Física. Grupo de Láser, Óptica de Materiales y Aplicaciones Electromagnéticas. Paseo Colón 850, C1063ACV Buenos Aires, Argentina.*
[2] *Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Tecnológicas (CONICET), Godoy Cruz 90, Buenos Aires, Argentina*

Previamente se implementó un interferómetro heterodino para la detección de señales ultrasónicas aplicado a tomografía optoacústica [1]. En el presente trabajo se analizan y caracterizan los artefactos introducidos en las imágenes con la finalidad de incluirlos en un modelo que contemple el comportamiento no ideal del detector interferométrico. Se observa que las señales están afectadas tanto por la geometría cilíndrica del sensor como por el ruido eléctrico. Este último posee frecuencias bien definidas dentro del espectro atribuibles tanto al proceso de heterodinaje como a la electrónica utilizada en el arreglo interferométrico heterodino. Los resultados de este trabajo permitirán el uso de la técnica de aprendizaje profundo para mejorar la calidad de las imágenes obtenidas con este tipo de sistemas tomográficos.

Referencias:

[1] R. Insabella, M. G. González, L. Riobó, K. Hass, and F. Veiras, App. Opt. **59**, 706 (2020).

Estudio de factores sensibilidad en una cabeza humana con lesiones mediante simulaciones de Monte Carlo

• Demián A Vera,[1] Héctor A García,[1] M Victoria Waks Serra,[1] Daniela I Iriarte,[1] Juan A Pomarico[1]

[1] *Centro de Investigaciones en Física e Ingeniería del Centro de la Pcia. de Buenos Aires (CIFICEN), UNCPBA - CONICET, Tandil, Argentina*

Diversas afecciones clínicas, entre las que se encuentran los accidentes cerebrovasculares (ACV) hemorrágicos y los traumatismos craneoencefálicos (TBI, por Traumatic Brain Injuries) pueden producir hematomas o edemas en el tejido cerebral. Si estas lesiones internas no son tratadas adecuadamente, pueden producir enfermedades a largo plazo e incluso la muerte.
Hoy en día el método preferido de diagnóstico temprano de lesiones traumáticas cerebrales es la Tomografía Computada (TC); sin embargo esta práctica es, en general, costosa e inviable para el monitoreo continuo de las lesiones.
Por otro lado, existen dispositivos basados en el uso de espectroscopía en el infrarrojo cercano (NIRS, por Near InfraRed Spectroscopy) que proveen una opción barata, fácilmente manipulable y transportable para identificar y monitorear la evolución de estas lesiones. Sin embargo, es crucial contar con modelos precisos de propagación de luz infrarroja a través de la cabeza humana para interpretar correctamente y mejorar las señales de salida de tales dispositivos.
En este trabajo se presentan simulaciones de Monte Carlo (MC) de propagación de luz infrarroja en un modelo de cabeza humana adulta extraída de una resonancia magnética (RM), con el objetivo de obtener un conjunto de factores de sensibilidad que den cuenta de la presencia y gravedad del tipo de lesiones aquí estudiado. En el presente estudio son consideradas cinco capas en el modelo: cuero cabelludo (CC), cráneo (CR), líquido cefalorraquídeo (CSF), materia gris (MG) y materia blanca (MB). Las lesiones se extienden desde el contorno exterior de la materia gris hacia dentro hasta la materia blanca; los parámetros a variar, además del tipo de lesión (hematoma o edema) son la distancia entre fuente y detectores de luz, y el propio volumen de la lesión.
Los hematomas son medios con gran presencia de hemoglobina, por lo que la luz NIR es fuertemente absorbida al atravesarlos. En cambio, los edemas de conformación acuosa, presentan baja absorción de luz NIR y muy baja o nula difusividad. Dada la geometría irregular de la cabeza y, sobre todo, los diferentes espesores del cráneo, lo que afecta considerablemente la llegada de luz a la corteza cerebral, dos zonas de la cabeza son tenidas en cuenta: frontal y parietal. La primera de ellas presenta un espesor craneal bastante mayor que la segunda, y ambas pueden ser afectadas por accidentes de diverso origen. Los resultados sugieren que la sensibilidad a lesiones en la zona parietal es mayor que la correspondiente en la región frontal, de gran grosor craneal. Por otro lado, la detección de luz se ve disminuida en presencia de hematomas y, por el contrario, en el caso de los edemas, la luz no solo penetra hasta zonas más profundas, sino que la detección de la misma se ve incrementada.

Estudio de fantomas antropomórficos de silicona para Mamografía Óptica

• M. Victoria Waks Serra,[1] Victoria Noseda Grau,[2,3] Demián A. Vera,[1] Sebastián Jodra,[2] Héctor A. García,[1] Nicolás A. Carbone,[4] Juan A. Pomarico,[1] Daniela I. Iriarte[1]

[1] *Centro de Investigaciones en Física e Ingeniería del Centro de la Pcia. de Buenos Aires (CIFICEN), UNCPBA - CONICET, Tandil, Argentina*
[2] *Instituto de Física de Materiales de Tandil - Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires*
[3] *Centro Atómico Bariloche - CONICET, Comisión Nacional de Energía Atómica*
[4] *BIONIRS Arg SA, Fugl 8 Dpto 12, Tandil, Bs As, Argentina*

En las últimas cuatro décadas la luz en el infrarrojo cercano se ha empleado como potencial herramienta para el diagnóstico en tejidos blandos y difusivos, como lo es el tejido mamario, mediante una técnica denominada Espectroscopia en el Infrarrojo Cercano (NIRS). Es especialmente útil como complemento de métodos ya establecidos, como los rayos X y el ultrasonido, ya que provee información complementaria como la composición del tejido y su oxigenación.
Recientemente la técnica ha avanzado de tal forma que en el mundo se han construido varios prototipos clínicos de Mamógrafos Ópticos, que están siendo testeados tanto en laboratorio como con pacientes. Uno de estos equipos en desarrollo corresponde a una EBT originada precisamente en nuestro grupo de investigación (bionirs.com); se trata de un prototipo de mamógrafo óptico que utiliza iluminación IR de onda continua y una cámara CCD como detector, evitando además la compresión de las mamas que es característica de las mamografías convencionales.
Debido a esto es de suma importancia contar con herramientas con las cuales testear, calibrar y validar los dispositivos de forma repetitiva y controlada. Tales herramientas, que deben reproducir lo más fielmente posible las características ópticas y mecánicas de los tejidos que han de emular, se denominan fantomas, y son comunes en varias ramas de la Física orientada a la Medicina.
Diversos materiales han sido estudiados para la elaboración de dichos fantomas, siendo uno de los más versátiles y convenientes la silicona PDMS. Ésta tiene la ventaja de ser transparente para un rango de longitudes de onda que contiene ampliamente a la ventana terapéutica, entre 600 nm y 900 nm, en la cual los tejidos biológicos presentan mínima absorción. Además de un material de base, son necesarios elementos que modifiquen la absorción y la difusión (scattering) del material con el cual se construyen los fantomas para poder reproducir las características ópticas del tejido a emular; normalmente se emplea toner de impresoras láser para controlar la absorción y dióxido de titanio (TiO_2) para variar el scattering. Sin embargo, este último material presenta grandes problemas, como dificultad para integrarse al medio huésped y consecuente sedimentación en el curado final del fantoma.
En este trabajo presentamos una forma novedosa para la construcción de los fantomas para Mamografía Óptica. En base a silicona PDMS, con el añadido de fluido de siliconas actuando como diluyente, elaboramos un fantoma de geometría y dureza tal que se comporta tanto óptica como mecánicamente de forma similar a un seno. Además, hemos encontrado un material novedoso, pintura acrílica, para aumentar el scattering de las muestras, que evita los grandes inconvenientes que poseen los materiales empleados normalmente. Estos fantomas han sido construidos tanto homogéneos como inhomogeneos, conteniendo inclusiones, para simular tejido mamario sano o enfermo, respectivamente. Como beneficio extra, tanto por su durabilidad (son no perecederos) como por su forma pueden ser empleados, con inclusiones de otros materiales, para estudios mediante ultrasonido, con lo cual se puede comparar los resultados obtenidos mediante la Mamografía Óptica con una técnica ya establecida.
Para validar los fantomas se han evaluado tanto sus propiedades ópticas (índice de refracción, coeficiente de absorción y reducido de scattering), mediante reflectancia y transmitancia difusa resuelta en el tiempo, como sus características mecánicas por medio de ensayos de compresión sobre muestras preparadas ad hoc. Los resultados comprueban que estos fantomas simulan correctamente un seno tanto mecánica como ópticamente.

Desarrollo de sensores de contaminantes ambientales basados en LPGs recubiertas con nanopartículas de plata

• Cristian Villa-Pérez,[1,2] Marcos Mineo,[2] Diego H. Alustiza,[2,3] Nélida A. Russo,[2] Valeria Arce[1,2]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas - Universidad Nacional de La Plata*
[2] *Centro de Investigaciones Ópticas, CONICET La Plata - CIC-BA*
[3] *Universidad Tecnológica Nacional - Facultad Regional La Plata*

La Resonancia Plasmónica de Superficie (SPR) es un fenómeno que se puede observar en materiales nanopartículados de metales nobles como el oro y la plata. La energía de la banda plasmónica depende de la geometría y del tamaño de las nanopartículas, por lo que es de gran interés desarrollar nanomateriales con diferentes características morfológicas. La SPR puede ser aprovechada en diferentes aplicaciones, entre las que destaca el sensado de sustancias mediante el recubrimiento de redes de período largo grabadas sobre fibra óptica (LPGs) con nanopartículas (NPs) metálicas. Las LPGs son dispositivos ópticos usados para sensar diferentes magnitudes físicas y químicas, y su respuesta espectral es altamente dependiente del medio que las rodea. En este proyecto de investigación, se busca por un lado la generación y caracterización de nanopartículas de plata a ser utilizadas en recubrimientos sensibilizantes y, por otro lado, la fabricación de dispositivos LPG sobre fibra óptica fotosensible, que en conjunto permitan la creación de sensores de diferentes contaminantes ambientales.
Se sintetizaron nanopartículas de plata con banda de resonancia plasmónica cercana a los 800 nm. El procedimiento de síntesis consistió en dos etapas, en la primera de las cuales se formaron semillas que posteriormente fueron sometidas a crecimiento controlado. La formación de las semillas se logra a partir de la reacción de un precursor de iones de plata, un agente reductor y sustancias que den soporte y estabilidad. El crecimiento de las partículas se hizo a partir de las semillas previamente obtenidas y del agregado de iones de plata y un agente reductor. Para finalizar la superficie de las NPs fue estabilizada con citrato sódico. Mediante el control de la cantidad de semillas utilizada en la segunda etapa se obtuvieron nanopartículas con la resonancia plasmónica centrada en la longitud de onda de interés. Las nanopartículas obtenidas han sido caracterizadas mediante diversas técnicas como espectroscopía UV-Vis y microscopía TEM.
La generación de LPGs se realizó mediante un mecanismo de grabado basado en la irradiación con un haz UV de una fibra óptica fotosensible a través de una máscara de amplitud, lo que generó un patrón de franjas sobre el núcleo de la fibra dopado con Ge, que moduló el índice de refracción del mismo. Dicha modulación es la responsable de acoplar el modo luminoso del núcleo a modos de alto orden propagados por el cladding en la misma dirección, lo que produce en la transmisión de la red una serie de bandas de atenuación en las longitudes de onda correspondientes a dichos acoplamientos. Para el grabado de las LPG se empleó como fuente de iluminación la cuarta armónica (266 nm) de un láser pulsado de Nd-YAG. La caracterización de las redes se realizó durante la fabricación, iluminando con una fuente SLED centrada en 800 nm y observando su respuesta en transmisión con un OSA. Las LPG obtenidas presentaron dos bandas de atenuación ubicadas en 781.13 nm y en 813.81 nm, con mínimos de transmitancia de -9.16 dB y -15.06 dB. Cada una de estas bandas de atenuación corresponde al acoplamiento de la luz guiada por el núcleo de la fibra, hacia un modo diferente del cladding. El dispositivo logrado se comporta como un filtro óptico con bandas de atenuación cuya posición (inicialmente determinada por la periodicidad del patrón de irradiación UV usado para el grabado) será modificada en correspondencia con la presencia de determinados productos contaminantes presentes en agua.
En una etapa posterior, las NPs serán ensambladas al dispositivo LPG mediante el uso de poliuretano como soporte para las nanopartículas, y después, se procederá a evaluar la factibilidad de uso de este sistema como sensor de diferentes contaminantes en fase acuosa.

Evaluación de las nanopartículas óptimas para su utilización en la construcción de un proyector 3D

• Cristián Antiba,[1] Guillermo Vaccaro,[1,2] Nicolas Esterlizzi[2]

[1] *Grupo de Experimentación Innovativa e Instrumental - UNR*
[2] *Grupo de Experimentación Innovativa e Instrumental*

En la actualidad, el estudio de las nano partículas, partículas con dimensiones en el intervalo de 1 y 100 nanómetros, es un área activa de investigación debido a que tienen potencial aplicación en rubros tan diversos como el diagnóstico por imagen, tratamiento de enfermedades, microscopía y otras aplicaciones en óptica, aceleración de reacciones químicas, cuestiones relacionadas a la conservación del medio ambiente, etc. Una característica de las nano partículas es que sus propiedades difieren de las propiedades del material que las compone en dimensiones tradicionales. Hay gran interés en la comunidad científica en la propiedad de algunas nano partículas de emitir radiación en el rango del espectro ultravioleta o el visible, al ser irradiadas con radiación comprendida dentro del rango del infrarrojo cercano. Este comportamiento, denominado emisión ascendente (up converting), es atípico ya que los fenómenos de fluorescencia tradicionales requieren que se utilice una fuente de radiación con mayor energía de la que se espera que emita la sustancia irradiada. En general, la respuesta a la excitación lumínica de las nano partículas sigue un patrón exponencial. Esta característica permite que puedan utilizarse dispositivos de bajo costo disponibles comercialmente para provocar el fenómeno de emisión ascendente, en lugar de costosos dispositivos que no son de fácil acceso para muchos de los equipos de investigación de nuestro país. Existen diversos mecanismos para fabricar las nano partículas: a través de reducción de tamaño en molinos (medios físicos), por descomposición térmica, reducción, deposición de vapores de metales, por vía electroquímica o por síntesis hidrotermal (medios químicos). La fabricación de estas requiere la utilización de solventes de alto punto de ebullición, compuestos tensioactivos y estabilizantes como el 1-octadeceno, el ácido oleico y la oleil amina, entre otros. Posteriormente a su fabricación, puede llegar a necesitarse realizar un tratamiento superficial, tanto para adecuar las nano partículas al medio en el que se van a utilizar, como es el caso de las utilizadas en medios biológicos o ambientales, así como para optimizar sus propiedades. Para el proceso de estabilización pueden utilizarse iones, polímeros, surfactantes y solventes de cadena larga. El objetivo principal del presente trabajo fue realizar una evaluación de los diferentes tipos de nanopartículas disponibles para ser aplicadas en la elaboración de un proyector 3D. En esta evaluación hemos tenido en cuenta el mecanismo de síntesis, estabilización y modificaciones post síntesis de las nano partículas y de los recursos humanos, físicos y de infraestructura necesarios para elaborarlas, realizar su caracterización estructural y analizar su estabilidad en diferentes sustratos. Hasta la fecha, las candidatas son las nanopartículas de emisión ascendente de fluoruro de iterbio y sodio (NaYbF4) o de fluoruro de itrio y sodio (NaYF4), en ambos casos dopadas con erbio (Er+3). Como objetivo secundario se persiguió la posibilidad de producir las nanopartículas a baja y mediana escala, tanto para satisfacer las necesidades de nuestro grupo de investigación como de otros grupos que puedan solicitarlas.

Técnicas holográficas para el estudio del llenado capilar en silicio poroso nano-estructurado

• María Florencia Martínez,[1] Marcelo Sallese,[2] Andrea Carolina Monaldi,[1] Raul Urteaga,[2] Nicolás Budini[2,3]

[1] *Grupo de Óptica Láser, Instituto de Investigaciones en Energía No Convencional (UNSa-CONICET)*
[2] *Instituto de Física de Santa Fe - IFIS - CONICET*
[3] *Dpto. de Física, Facultad de Ingeniería química, UNL, Santa Fe*

En los últimos años, el estudio y caracterización de estructuras micro- y nano-porosas han adquirido gran relevancia en ramas como la medicina, biotecnología, nano-fluídica, entre otras. En particular, reviste de interés el estudio del proceso de llenado capilar por imbibición de un líquido, ya que el mismo se encuentra presente en diferentes campos que involucran sistemas microfluídicos, flujo a través de medios porosos, contaminación de aguas subterráneas, recuperación de aceites enriquecidos, por mencionar algunos. En este trabajo se presentan los avances relacionados con la puesta a punto de los sistemas experimentales utilizados para el estudio del proceso de imbibición capilar en sustratos nano-porosos de Silicio. Para ello, se emplea un interferómetro del tipo Michelson, en una configuración por reflexión y un interferómetro de Mach Zehnder, con configuración por transmisión. Asimismo, se exponen los algoritmos de procesamiento digital que permiten reducir las aberraciones lineales y esféricas, asociadas a los hologramas, al aplicar técnica óptica mencionada. Estas aberraciones surgen debido a los arreglos experimentales empleados y deben corregirse, con el objeto de tener acceso específicamente a la información de interés.

Estudio por métodos ópticos de las propiedades higroscópicas de compositos a base de diatomea/urea

• Ruth Dary Mojica-Sepúlveda,[1,2] Luis Joaquin Mendoza-Herrera,[1,2] Carmen Cabello,[1,3] Guillermo Bertolini,[1,3] Mercedes Muñoz,[1,3] Eduardo Grumel,[1,2] Myrian Tebaldi,[1,2] Marcelo Trivi[1,2]

[1] *Facultad de Ingeniería - Universidad Nacional de La Plata*
[2] *Centro de Investigaciones Ópticas (CIOp - CONICET - UNLP - CICPBA)*
[3] *Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas, CONICET-UNLP*

La capacidad de adsorción (y por tanto la capacidad higroscópica) de los materiales es altamente dependiente de las propiedades químicas de las superficiales (adsorción) y de sus propiedades texturales (área de superficie específica, porosidad, etc.). Estas características son determinantes en diversas aplicaciones industriales.
La técnica convencional más utilizada para la caracterización de propiedades texturales y de adsorción, es la adsorción/desorción de nitrógeno. Sin embargo, ésta presenta algunas desventajas operativas, equipamiento especializado y costoso. Además, la misma brinda solo resultados promedio para toda la superficie, siendo por lo tanto inadecuada en el caso de materiales de superficie heterogénea con regiones de diferente capacidad de adsorción. Es importante mencionar que la técnica de adsorción de nitrógeno no puede ser utilizada en algunas sustancias. Por ejemplo, en la urea de interesante aplicación en agroindustria y medicina.
En trabajos previos mostramos la factibilidad del uso de la técnica Laser Speckle Dinámico (DLS) como herramienta alternativa de bajo costo y simpleza operativa en relación con los métodos convencionales. A su vez permite mejorar la precisión en la determinación de los parámetros texturales de materiales adsorbentes. En este trabajo presentamos resultados preliminares de la aplicación de la técnica DLS en compositos de diatomea/urea de diferentes proporciones, que permiten discriminar los tiempos característicos para la hidroadsorción de los mismos.

Vías intracelulares de difusión de la proteína de cápside del virus del dengue visualizadas por espectroscopías de correlación

• Ignacio Sallaberry,[1,2] Alexis Luszczak,[2] Natalia Philipp,[1,2] Guadalupe Costa-Navarro,[3,4] Manuela Gabriel,[1,2] Andrea Gamarnik,[3,4] Laura Estrada[1,2]

[1] *IFIBA-CONICET*
[2] *Laboratorio de Electrónica Cuántica, Departamento de Física, FCEyN-UBA*
[3] *Fundación Instituto Leloir*
[4] *CONICET*

La familia Flaviviridae constituye al conjunto de los virus causantes de enfermedades como el virus del dengue (DENV), el virus del Zika y el virus de la fiebre amarilla, entre otros. DENV afecta a cientos de millones de personas al año en todo el mundo, provocando un tremendo impacto social y económico en los países afectados. Sin ir más lejos, hace poco más de 1 año, en medio de la pandemia por el Sars-CoV-2, nuestro país experimentó la epidemia de dengue más importante de su historia lo que constituye una muestra concreta de la relevancia y urgencia para atender este tipo de enfermedades.
En trabajos previos se ha demostrado que la proteína de la cápside (C) del virus del dengue ingresa al núcleo de las células infectadas. Sin embargo, el mecanismo por el cual la proteína C se importa al núcleo sigue sin estar claro. En este trabajo, mediante la correlación espacial de pares de la intensidad de fluorescencia colectada en diferentes regiones de la célula, estudiamos el transporte de C-DENV a través de la envoltura nuclear durante el ciclo de infección. De esta forma, logramos observar un transporte activo durante la importación de proteína C. Además, pudimos determinar que esta proteína también sale del núcleo. Ambos mecanismos de transporte ocurren con tiempos de translocación similares, ambos en la escala de los milisegundos. Hasta donde sabemos, este es el primer estudio que proporciona evidencia experimental que muestra un transporte de la proteína C de DENV en ambas direcciones (citoplasma núcleo y núcleo-citoplasma).
También estudiamos la dinámica de C-DENV a partir de la correlación de pares correspondientes a regiones intracitoplasmáticas y en regiones nucleares. De esta forma, identificamos en cada compartimento dos poblaciones de proteína C con diferentes movilidades (una población rápida y otra lenta). Mientras que en el citoplasma los tiempos de correlación medidos se encuentran en el rango de 2-6 ms y 40-110 ms para las poblaciones de movilidad rápida y lenta respectivamente, en el núcleo celular los tiempos de correlación obtenidos están en el rango de los 1-10 ms y 25-140 ms, respectivamente. Cuando los tiempos de correlación obtenidos se traducen en coeficientes de difusión, las poblaciones de movilidad rápida tanto en citoplasma como en el núcleo de células infectadas concuerdan con los coeficientes de difusión obtenidos en trabajos previos.
Finalmente realizamos un estudio distinguiendo zonas cercanas y alejadas a la membrana nuclear. Mientras que para el caso citoplasmático se observó que al alejarse de la membrana hay una reducción de la población lenta respecto de la rápida; para el caso del núcleo esto no sucede, manteniéndose la misma proporción de poblaciones rápida y lenta tanto cerca como lejos de la membrana.
En conjunto, los resultados aquí reportados permitieron hacer una descripción detallada de los mecanismos de transporte de cápside en el núcleo, en el citoplasma así como el transporte bidireccional entre ambos compartimentos de células infectadas. Creemos que los hallazgos obtenidos podrían tener un gran impacto en el desarrollo de una generación de antivirales y vacunas.

Procesamiento de señales de Interferométricas de baja coherencia con deep learning

• Santiago Cerrotta,[1,2] Eneas Morel[1]

[1] *Grupo de Fotónica Aplicada – Facultad Regional Delta – Universidad Tecnológica Nacional*
[2] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*

La técnica de interferometría de baja coherencia en el dominio de las frecuencias (FD-LCI) [1] permite medir las diferencias de camino óptico (DCO) siendo de gran utilidad para la caracterización de la topografía diferentes materiales. Debido a su precisión micrométrica, velocidad y rango de medición máxima de milímetros, su velocidad y su carácter no invasivo encuentra muchas aplicaciones en el ámbito industrial para la caracterización de productos y/o procesos en rubros que van desde la metalurgia hasta los plásticos pasando por polímeros y recubrimientos [2]. La información de la DCO está relacionada con la frecuencia de oscilación de la señal detectada en el espectrómetro y convencionalmente se realiza la transformada de Fourier para calcularla. Para mejorar este análisis se suele pre-procesar la señal realizando acciones como normalizar, recortar, extraer la envolvente, subtraer la señal continua, remuestrear, entre otras Por otro lado la Inteligencia artificial (IA) y el deep learning (DP), han comenzado a crecer y a aplicarse de manera exponencial en estos últimos años en disciplinas de lo mas variadas que van desde el área las Comunicaciones mediante reconocimiento de voz hasta la Medicina mediante el diagnóstico de enfermedades [3]. En este trabajo se busca incorporar el DP al área de la Fotonica en especial al procesado de la técnica de FD-LCI. Para eso, se simularon señales de FD-LCI caracterizando las peculiaridades típicas y se entrenaron diferentes redes neuronales (RN) para calcular la DCO desea. Se diseñaron RN del tipo densamente conectadas y convolucionales que sean capaces de estimar la frecuencia de las señales [4] para las distintas etapas de procesado y se analizó su precisión, tiempo de entrenamiento y de ejecución. Se comprobó que efectivamente se pueden estimar frecuencias de señales y obtener la DCO mediante el uso de RN con gran precisión reemplazando la transformada de Fourier y gran parte del pre-procesado. Además, la gran capacidad de especificidad y personalización que se logra con el entrenamiento de las RN permitiría compensar aberraciones propias de la técnica, evitar artefactos inherentes de la detección y minimizar dificultades puntuales de la muestra que se desea analizar.

Referencias:

[1] W. Drexler and J. G. Fujimoto, *Optical Coherence Tomography: Technology and Applications*, Springer Publishing, Berlin, Heidelberg (2008).
[2] S. Cerrotta, E. N. Morel, and J. R. Torga, *Scanning Optical Coherence Tomography Applied to the Characterization of Surfaces and Coatings,* Procedia Mater. Sci. **9**, 142 (2015).
[3] A. Vaswani, N. Shazeer, N Parmar, *et al.*, *Attention Is All You Need*, 31st Conference on Neural Information Processing Systems (NIPS 2017), Long Beach, CA, USA.
[4] Almayyali, H.R. and Hussain, Z.M. *Deep Learning versus Spectral Techniques for Frequency Estimation of Single Tones: Reduced Complexity for Software-Defined Radio and IoT Sensor Communications*, Sensors **21**, 2729 (2021).

Diseño de un espectrómetro basado en speckle con procesamiento óptico

• Lucas Mendicino,[1] Christian Schmiegelow[1]

[1] *Depto. Física, FCEyN (UBA) - IFIBA - CONICET*

En los últimos años los espectrómetros de speckle han demostrado resoluciones del orden del attómetro [1], sin embargo los tiempos de adquisición asociados a este método quedan determinados por la velocidad de sampleo de una cámara CCD, típicamente del orden de los milisegundos, esto pone una limitación para el uso de esta tecnología en la estabilización activa de láseres a referencias ópticas. En este trabajo se propuso un modelo de espectrómetro de speckle cuyo procesamiento no sea digital, sino óptico. Se diseñó un procesador óptico previo a la adquisición basado en el método de wavefront matching [2], de forma que la adquisición de la señal sea realizada con un par de fotodiodos pudiendo alcanzar frecuencias de sampleo del orden del GHz, de esta forma resulta ser una mejor referencia óptica ya que permite estabilizar láseres activamente hasta esa frecuencia. Se estudiaron numéricamente los límites de funcionamiento del espectrómetro utilizando la librería de Python LightPipes [3]. Las simulaciones consisten en propagar luz a través del espectrómetro, que está constituido por un generador de speckle y un procesador óptico, y estudiar la diferencia de intensidad detectada entre los fotodetectores. Se reporta una resolución del espectrómetro de $\delta\lambda \sim 10^{-2} l_c$ y un rango dinámico de $RD \sim 10^2 l_c$, siendo l_c el límite de correlación espectral del speckle generado, que típicamente es del orden del picómetro por lo que este diseño alcanzaría resoluciones del orden de decenas de femtómetros.

Referencias:

[1] R. K. Gupta, G.D. Bruce, S. J. Powis and K. Dholakia. *Deep Learning enabled Laser Speckle Wavemeter with a High Dynamic Range*, Laser Photonics Rev. **14**, 2000120 (2020).
[2] N. K. Fontaine, R. Ryf, H. Chen, D. T. Neilson, K. Kim and J. Carpenter. *Laguerre-Gaussian mode sorter*, Nat. Commun. **10**, 1 (2019).
[3] F. van Goor and G. Vdovin. LightPipes for Python, LightPipes

Estudio de la migración celular y el fenómeno de durotaxis a partir de modelos sencillos de paseadores al azar

• Alejandra Fernández ,[1] Lía Pietrasanta,[1] Silvina Ponce Dawson[1]

[1] *Departamento de Física-IFIBA, FCEN, Universidad de Buenos Aires*

Las células detectan, procesan y traducen la información mecánica que proporciona el entorno extracelular para tomar decisiones sobre crecimiento, motilidad y diferenciación (Geiger et al, 2009). En particular, la rigidez del microambiente impacta en la diseminación celular, la morfología celular, la organización y contractilidad del citoesqueleto, y en la diferenciación de células madre. Las células detectan activamente la rigidez de su entorno, ejerciendo fuerzas de tracción a través de las adhesiones focales. Durante la migración celular se observa el fenómeno conocido como durotaxis, que es la tendencia de las células a moverse hacia el tejido rígido.

Existen diversos tipos de modelos matemáticos para describir la durotaxis, con mayor o menor nivel de detalle. Siguiendo la línea del modelo desarrollado en (Doering et al, 2018), se estudiaron distintos modelos sencillos de paseadores al azar para una y dos dimensiones espaciales.

Al estudiar las funciones de distribución acumulada (CDF) de los modelos se observó, en algunos de ellos, un desplazamiento notable hacia una dirección lo cual reproduce el comportamiento de resultados experimentales en los que se observa que las células se desplazan a mayor velocidad y cambian con menor probabilidad su dirección de movimiento cuanto más duro sea el sustrato en el que se encuentran.

Por otro lado, tras un análisis temporal, se determinó la velocidad de desplazamiento promedio y la dispersión alrededor de ese valor medio. Esto nos da la información de la velocidad de deriva y el coeficiente de difusión.

Finalmente, las predicciones de los modelos se compararon con datos obtenidos del análisis de un set de imágenes tomadas a través del tiempo de una línea celular donde puede apreciarse movimiento celular.

Referencias:

[1] Geiger, B., Spatz, J. P. and Bershadsky, A. D. *Environmental sensing through focal adhesions*, Nat. Rev. Mol. Cell Biol. **10**, 21 (2009).

[2] Doering, C., Mao, X., and Sander, L. *Random walker models for durotaxis*, Phys. Biol. **15**, 066009 (2018).

Diseño racional de potenciales inhibidores esteroidales de acetilcolinesterasa para el tratamiento de la enfermedad de Alzheimer

• Dante Stratico,[1] Victoria Richmond,[1] Marcelo Otero[2]

[1] *UMYMFOR-CONICET, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, C1428EGA, Buenos Aires, Argentina*
[2] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Instituto de Física de Buenos Aires, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas*

La Enfermedad de Alzheimer (EA) es una enfermedad neurodegenerativa que genera pérdida de memoria y de las funciones cognitivas. Actualmente, la mayoría de los tratamientos intentan restituir a niveles fisiológicos la concentración de acetilcolina (AC) disminuida en la EA, mediante la inhibición de la enzima acetilcolinesterasa (ACE) y de esta manera mejorar las capacidades cognitivas de quienes padecen esta enfermedad. Esta enzima es la responsable de hidrolizar la AC en la hendidura sináptica, con lo cual su inhibición incrementa los niveles de AC en el cerebro. Dado que para el año 2050 se espera que 50 millones de personas alrededor del mundo padezcan demencia, es importante abordar la búsqueda de nuevos agentes inhibidores de la enzima ACE (IACEs), con el objetivo de encontrar fármacos más potentes, específicos y seguros. Este trabajo forma parte de un proyecto de búsqueda de nuevos IACEs, basado en la modificación del esteroide $2\beta, 3\alpha - dihidroxi - 5 - colestan - 6 - ona$, cuyo derivado disulfatado presenta actividad IACE a nivel micromolar. Con estos antecedentes, se propone la hipótesis de que una correcta funcionalización de la cadena lateral del esteroide le otorgaría mayor afinidad proteína-ligando al sumar interacciones entre la cadena lateral y el sitio activo de la enzima, aportándole así actividad IACE. Con este objetivo se creó una biblioteca virtual de 5.000 esteroides con diferente funcionalización de las cadenas laterales utilizando la reacción multicomponente de Ugi y, por tal, son denominados compuestos Ugi. Una vez formada la biblioteca, se procedió a realizar un screening virtual con sucesivos pasos de filtrado, en busca de los candidatos más prometedores a ser IACEs, para ser estudiados finalmente mediante simulaciones por dinámica molecular.

El primer paso del screening virtual consistió en un estudio de docking de los compuestos Ugi frente a la ACE, en donde se evaluó la energía de unión proteína-ligando. Se seleccionaron 576 compuestos que distan 2 Kcal/mol respecto del compuesto Ugi con mayor afinidad a la enzima. Para realizar posteriores estudios de modelado molecular, fue necesario filtrar el número de candidatos a estudiar. Para ello se recopiló información de IACEs de la base de datos ChEMBL en busca de similitud entre los compuestos IACEs y los Ugi a través de la comparación de 19 descriptores moleculares. Se llevó a cabo posteriormente un Análisis de Componentes Principales (PCA) de los IACEs y se proyectaron los compuestos Ugis en dicho espacio. Se buscó similitud entre los mismos utilizando como criterio minimizar la distancia euclídea IACEs−Ugi en el espacio 3D definido por las tres primeras componentes principales. Se continuó luego el filtrado eligiendo aquellos compuestos con mayor potencial permeabilidad de la barrera hematoencefálica (BHE), utilizando dos técnicas: Adaptative Boosting y Support Vector Machine. Para ello fue necesario describir los compuestos mediante FingerPrints del tipo Molprint2D. A partir de este estudio se seleccionaron 10 compuestos con mayor tendencia a atravesar la BHE. Finalmente, se realizaron simulaciones de dinámica molecular para los 10 compuestos Ugi seleccionados, estudiando las energías de unión Ugi-ACE a lo largo del tiempo de simulación (100 ns). Se descartaron 2 compuestos debido a su baja afinidad con la enzima. Para los 8 compuestos Ugi restantes, se analizaron los modos de unión a la enzima y las interacciones Ugi-ACE durante la simulación. 7 de los 8 compuestos seleccionados cumplen con la hipótesis al interaccionar con aminoácidos de sitio activo de la ACE.

Habiéndose obtenido candidatos prometedores a ser IACEs que avalan la hipótesis planteada, la próxima etapa consistirá en la confirmación experimental a través de bioensayos.

Aplicación de herramientas quimioinformáticas para el análisis exploratorio de compuestos antifúngicos agrícolas

• María Liliana Miranda Sanguino,[1] Victoria Richmond,[1] Pau Arroyo Mañez,[1] Marcelo Otero[2]

[1] *UMYMFOR-CONICET, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, C1428EGA, Buenos Aires, Argentina*
[2] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Instituto de Física de Buenos Aires, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas*

En un país agroexportador como la Argentina deben dirigirse esfuerzos de investigación para combatir enfermedades producidas por hongos que afectan los cultivos de mayor interés económico como la soja, el trigo, el maíz, entre otros. En este sentido, el uso de herramientas computaciones para el desarrollo de nuevos compuestos con actividad antifúngica presenta las mismas ventajas que aquellas demostradas en el desarrollo de cualquier fármaco: rapidez, disminución de costos y pérdidas asociadas con la síntesis de compuestos que terminan siendo inactivos, etc. No obstante, a diferencia de otras drogas, durante los últimos años el desarrollo de compuestos antifúngicos novedosos se ha hecho una necesidad latente en vista de la creciente aparición de hongos resistentes a los distintos fungicidas comerciales y a su toxicidad. Por ello resulta necesario ampliar el espectro de compuestos con actividad antifúngica, sumar nuevos blancos/modos de acción, junto a la aplicación de otras estrategias como buenas prácticas agrícolas, desarrollo de genotipos resistentes, por sólo mencionar algunas.
Con el objeto de estudiar las propiedades de los antifúngicos agrícolas, se creó una base de datos de 210 compuestos antifúngicos de uso agrícola, aceptados por la Fungidice Resistence Action Committee (FRAC), clasificados por mecanismo de acción (respiración, metabolismo de ácidos nucleicos, biosíntesis de esteroles, transducción de señales, etc.), blanco molecular y naturaleza química. Además, se construyó una segunda base de datos de 600 mil compuestos bioactivos de peso molecular menor a 1000 g/mol, extraída de CHEMBL. Los compuestos de ambas bases fueron caracterizados a través de descriptores moleculares relacionados a diversas propiedades geométricas, fisicoquímicas, estructurales y de complejidad molecular, las cuales correlacionan con propiedades importantes tales como la biodisponibilidad, la capacidad de traspasar membranas celulares, la liposolubilidad y la especificidad estructural. Se exploraron y estudiaron ambas bases de datos utilizando técnicas de estadística multivariada y de machine learning tales como técnicas de reducción de la dimensión, técnicas de clusterización jerárquicas y no jerárquicas, tests de hipótesis y técnicas de visualización y análisis exploratorio de datos. A través de un Análisis de Componentes Principales (PCA) se proyectaron los compuestos antifúngicos sobre el espacio químico determinado por los 600 mil compuestos bioactivos, teniendo en cuenta solamente las primeras tres componentes principales. Se encontró que los antifúngicos agrícolas, vistos en forma global, se agrupan en una zona definida del espacio químico, lo que evidencia un rango restringido de sus propiedades. Por otro lado, realizando PCA sólo para los compuestos antifúngicos, se evidencia una diferente ubicación en el espacio químico solamente para ciertas familias de antifúngicos, las cuales fueron comparadas, a posteriori, a través de técnicas exploratorias de datos para estudiar la naturaleza de sus diferencias y similitudes. El siguiente paso de la investigación consistirá en identificar nuevos descriptores que puedan incorporarse al análisis y mejoren la separación de antifúngicos en subgrupos de acuerdo con su modo de acción y blanco molecular, lo cual constituiría una herramienta útil en el diseño racional de fármacos.

Estudio de la formación de quelatos Quercetina - Cu(II) mediante dinámica molecular

• Mario Guillermo Campo,[1] Griselda Mónica Corral[1]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad Nacional de La Pampa*

La quercetina (QU) es considerada uno de los flavonoides dietéticos más comunes y biológicamente más activos. Está muy presente en la dieta humana, siendo su ingesta dietética de alrededor 16 mg / día. Entre otros, los efectos beneficiosos de QU están relacionados con su capacidad para quelar iones metálicos (Fe (II) y Fe (III), Cu (II), etc.). La QU puede capturar iones metálicos por quelación y, evitando la generación mediada por metales de radicales oxidantes dañinos, puede proteger los posibles objetivos biológicos del estrés oxidativo. Existen en la bibliografía muchos trabajos que tratan sobre la formación de complejos de QU con metales, como Al (III), Fe (II), Fe (III) y Cu (II), etc. Sin embargo, los datos sobre la composición, estructura y características de formación de complejos son a veces incompletos y contradictorios. En este trabajo estudiamos por dinámica molecular clásica la formación de complejos QU - Cu(II) en solución, sus caracterısticas de hidratación y su comportamiento dinámico. Los modelos de QU se desarrollan en la base AMBER99, salvo las cargas atómicas que se calculan con el módulo ESP del software NWChem utilizando la base 6-31G. Como solvente se utiliza el agua SPC/E. Para la dinámica molecular se emplea el paquete de simulación GROMACS, analizando funciones de distribución radial, números de hidratación, formación de puentes de hidrógeno en sitios de interés, y coeficientes de difusión de QU e iones presentes en la solución.

Integración de redes complejas para descubrimiento de patrones regulatorios en sistemas biológicos aplicado al splicing alternativo en Arabidopsis thaliana

• Andrés Rabinovich,[1] Ariel Chernomoretz[1,2]

[1] *Fundación Instituto Leloir*
[2] *Departamento de Fisica, FCEyN, UBA*

ANTECEDENTES: El Splicing Alternativo (SA) ha sido propuesto como un mecanismo de regulación postranscripcional que permite incrementar la diversidad transcriptómica en organismos Eukaryotas. El SA implica la interacción de factores de splicing con sus targets de forma coordinada, en maneras que aún no son comprendidas en su totalidad.
RESULTADOS: En este trabajo estudiamos los patrones de organización que emergen a nivel de splicing y su relación con la regulación transcripcional para comprender la regulación subgénica a nivel sistémico. Para ello, consideramos datos de una serie temporal de RNA-Seq de Arabidopsis thaliana obtenidos en un experimento a dos temperaturas, 22º y 4º. Utilizando ASpli, un paquete de análisis de datos de RNA-Seq desarrollado en nuestro laboratorio, primero caracterizamos los cambios en los patrones de splicing y de expresión entre ambas temperaturas. Luego, utilizando un esquema basado en Random Forest, construimos para cada temperatura una red compleja de dos capas consistente en una capa de regulación transcripcional, una capa de co-splicing y la relación entre ambas. Finalmente, comparamos ambas redes para obtener los cambios en los patrones de regulación, tanto de splicing como de transcripción, que surgen como respuesta al cambio de temperatura.
CONCLUSIONES: Utilizando ASpli, un paquete de análisis de datos de RNA-Seq desarrollado en nuestro laboratorio, logramos construir e integrar redes de regulación de splicing y de transcripción, descubriendo cambios en los patrones de regulación en A. thaliana en respuesta a cambios en la temperatura, con posible relevancia biológica.

Detección no supervisada de grupos biológicamente robustos en datos de expresión de ARN en célula única

• Ariel Berardino,[1,2] Ariel Chernomoretz,[1,2] Luz Vercesi,[1,2] Tomas Vega-Waichman,[2] Damiana Giacomini,[2] Natali Rasetto,[2] Alejandro Schinder[2]

[1] *Departamento de Fisica, FCEyN, UBA*
[2] *Instituto de Investigaciones Bioquímicas de Buenos Aires*

Las técnicas de secuenciación de ARN de célula única permiten caracterizar al conjunto de genes que se encuentran activos en una célula para un ensamble de decenas de miles de células en un mismo ensayo. A partir de estos datos, las estructuras reconocidas en variedades de baja dimensión dan lugar a la imagen de paisajes transcripcionales, que permiten explorar la variabilidad celular, identificar nuevos tipos celulares y descubrir vías de desarrollo a niveles moleculares. Sin embargo, la detección de patrones en la escala adecuada para revelar la biología relevante no es una tarea fácil. Por lo general, la curación manual es necesaria para identificar la resolución correcta en la que las células deben agruparse. En este estudio preliminar, proponemos un método no supervisado que aprovecha la información biológica para descubrir grupos de células con significado biológico. Utilizando nuestra metodología en un conjunto de datos público y anotado (Hochgerner2018), mostramos que el procedimiento no supervisado propuesto produce resultados sólidos y puede recapitular el tipo de célula anotado proporcionado por los autores de la publicación original.

Estudio de la dinámica y estado de oligomerización de proteínas de la levadura Saccharomyces cerevisiae a partir de espectroscopías de correlación de fluorescencia

• Natalia Philipp,[1] Laura C. Estrada,[1] Alejandro Colman-Lerner[2,3]

[1] *Instituto de Fisica de Buenos Aires y Departamento de Fisica, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires*
[2] *Departamento de Fisiología, Biología Molecular y Celular, FCEyN, UBA*
[3] *Instituto de Fisiología Biología Molecular y Neurociencias, CONICET-UBA*

Los métodos basados en el análisis de las fluctuaciones de una señal óptica detectada han cobrado mucha relevancia en el estudio cuantitativo de imágenes con diversas aplicaciones que van desde sistemas biofísicos hasta estudios ambientales y la industria [1]. En este trabajo mostramos cómo, a partir del cálculo de la distribución de fotones detectados aplicado a imágenes de microscopía confocal de fluorescencia de levaduras Saccharomyces cerevisiae es posible establecer un mapa de la concentración y el estado de oligomerización molecular con resolución de un pixel (decenas de nanómetros).
Con este objetivo en mente, en una primera etapa realizamos simulaciones numéricas basadas en movimientos Brownianos modelando el sistema para probar los límites de la técnica y así optimizar los parámetros de adquisición de las imágenes. Para esto estudiamos la cantidad mínima de imágenes y píxeles necesarios para obtener resultados robustos así como probamos los alcances de la técnica para detectar distintos estados de oligomerización y la relación entre la concentración y el estado oligomérico. En una segunda etapa, aplicamos el método al análisis de imágenes correspondientes a un factor de transcripción de las levaduras (que dirige la expresión de genes). Los resultados obtenidos en esta tesis muestran que dicho factor se encuentra en el núcleo celular formando un oligómero de doble tamaño respecto al que tenía en el citoplasma de la misma célula, lo cual no había sido observado previamente. También estudiamos una proteína que participa en la respuesta ante feromona sexual, encontrando distintos estados oligoméricos, con una posible dependencia con el estado nutricional de la levadura. Este tipo de análisis permite entender en profundidad la dinámica y el estado de proteínas u otras moléculas marcadas utilizando imágenes tomadas por microscopios como los que se encuentran en la mayoría de los laboratorios.

Referencias:

[1] Michelle A. Digman, Rooshin Dalal, Alan F. Horwitz, and Enrico Gratton. *Mapping the Number of Molecules and Brightness in the Laser Scanning Microscope*, Biophys. J. **94**, 2320 (2008).

Determinación de la incertidumbre en los potenciales de interacción Lifshitz van der Waals entre bacterias y biomateriales

• Jonathan Maximiliano Schuster,[1,2,3] Margarita Ester Laczeski,[2] Mario Roberto Rosenberger[2,3]

[1] *Universidad Nacional del Alto Uruguay*
[2] *Facultad de Ciencias Exactas, Químicas y Naturales - Universidad Nacional de Misiones*
[3] *Instituto de Materiales de Misiones*

Actualmente la teoría de Derjaguin-Landau-Verwey-Overbeek extendida (X-DLVO) es muy utilizada para calcular la energía de interacción (EI) y así modelar la interacción entre células bacterianas y biomateriales de interés. Según esta teoría la EI en un medio acuoso es la suma de la energía libre de interacción de Lifshitz van der Waals (LW), la energía libre de interacción de la doble capa electrostática y la energía libre de interacción ácido-base de Lewis (atracción hidrofóbica y repulsión hidrofílica) [1]. Para estimar la EI entre un morfotipo bacteriano determinado y una superficie sólida sumergida en medio acuoso, es factible suponer a la bacteria como una esfera lisa y a la superficie como completamente plana y calcularlo a partir de la aproximación de Derjaguin [2]. Sin embargo, esta aproximación no es suficiente para abordar el cálculo de la EI a partir de suposiciones más realistas, como pueden ser: rugosidad de superficie bacteriana, rugosidad del material, nanoestructura del material, entre otras. Resulta entonces necesario recurrir al método de integración de elementos de superficie (SEI) para encontrar la EI correspondiente a la geometría planteada, la aplicación de este método requiere definir los parámetros geométricos y exige la resolución numérica de integrales dobles [2].
La aplicación de la teoría X-DLVO demanda conocer parámetros del sistema como: la constante de Hamaker y el Potencial zeta de las entidades que interactúan, además de la energía libre de interacción acido-base, entre otros [1-2]. En general, dichos parámetros tienen asociada una incerteza no despreciable. Surge así la necesidad de tener un método seguro y práctico para efectuar la propagación de la incertidumbre en la EI final cuando es calculado mediante SEI, ya que el mismo no resulta trivial.
Una opción para la propagación de incertidumbre es el Método de Montecarlo (MM) [3]. Con la finalidad de aplicar y evaluar la efectividad del MM en la situación descripta, se realizó la propagación de incertidumbre en el potencial LW obtenido mediante SEI. Se consideró a la bacteria como una esfera perfecta y a la superficie como plana y lisa. Esta incertidumbre se comparó con la incertidumbre obtenida a partir de la expresión analítica exacta del potencial LW [1]. El potencial LW a una distancia bacteria-sólido determinada es función de cuatro parámetros: la componente LW de la energía libre superficial del sólido y de la bacteria, la constante de Hamaker del agua y la constante llamada distancia mínima de equilibro [1-2]. Para los cuatro parámetros se consideró una distribución de valores continua uniforme y acotada que representa la incertidumbre asociada al parámetro. Los valores y la incertidumbre de los parámetros se tomaron de la bibliografía [4].
Se observó que las incertidumbres obtenidas por el MM para el potencial LW obtenido mediante SEI y el obtenido mediante la expresión exacta fueron muy similares. La incertidumbre obtenida por SEI fue 1.02737 veces mayor (2.7 %) a la obtenida por la expresión exacta. Se concluye que el método propuesto es fiable para la propagación de incertidumbres en el caso de potenciales LW obtenidos mediante SEI.

Referencias:

[1] C. J. Van Oss *et al.*, Clays Clay Miner. **38**, 151 (1990).
[2] S. Bhattacharjee and M Elimelech, J. Colloid Interface Sci. **193**, 273 (1997).
[3] C E Papadopoulos and H Yeung, Flow Meas. Instrum. **12**, 291 (2001).
[4] J Azeredo *et al.*, Colloids Surf. B. **14**, 141 (1999).

Caracterización biomecánica de una membrana de pericardio bovino durante las etapas de su procesado para bioprótesis

• Juan Pedro Staneck,[1,2] Victoria Tambella,[3,4] Hernan Moscuzza,[3] Facundo Arriaga,[2,5] Fernando Lanzini[2,5]

[1] *ANPCyT*
[2] *Instituto de Física de Materiales Tandil (IFIMAT), Fac. de Cs. Exactas, UNCPBA*
[3] *Grupo de Medicina Veterinaria Translacional (MEVET), Departamento de Clínica, Fac. de Cs. Veterinarias, UNCPBA*
[4] *Hospital Escuela de Grandes Animales (HEGA)*
[5] *CONICET*

Las hernias umbilicales muestran una elevada incidencia en grandes animales, y su resolución quirúrgica requiere, en los casos complejos, la colocación de prótesis. No existen en nuestro país mallas desarrolladas y homologadas para su uso en veterinaria, y los elevados costos de las prótesis comerciales sintéticas de medicina humana, sumado a la imposibilidad de usarlas en heridas contaminadas, condicionan su uso. Como respuesta, el grupo HEGA-FCV-UNCPBA redujo con éxito quirúrgico defectos umbilicales en terneros utilizando una bioprótesis de pericardio bovino diseñada y desarrollada para tal fin. El pericardio bovino es un tejido ampliamente utilizado en el desarrollo de bioprótesis, que debe ser sometido a un procesamiento químico riguroso para que sea inocuo, por lo que podría verse afectada su estructura. Es necesario entonces, conocer si dicha alteración estructural modifica las propiedades mecánicas del material para estimar si existiera potencial riesgo en su desempeño postquirúrgico como contención visceral. La producción de esta bioprótesis de bajo costo y caracterizada físicamente da posibilidad de solución a defectos frecuentes de grandes animales manteniéndolos en los sistemas de producción o circuitos deportivos, y también es un potencial modelo experimental para ser extrapolado a la medicina humana. La caracterización biomecánica del material fue realizada por el grupo Propiedades Mecánicas y Transformaciones de Fase del IFIMAT-UNCPBA a través de ensayos mecánicos, en un trabajo interdisciplinar.

En este trabajo se presenta la metodología usada para el estudio de la deformación en pericardios de origen bovino mediante ensayos de tracción uniaxiales a velocidad de deformación constante. Dichos ensayos fueron realizados sobre probetas en forma de cintas rectangulares, obtenidas a través del corte del saco pericárdico en tres direcciones distintas respecto al eje mayor, a efectos de analizar la anisotropía en la respuesta mecánica del material. Además se analiza la influencia en las propiedades mecánicas en las distintas etapas del procesamiento del pericardio: tejido madre, tejido conservado en glutaraldehído (GA) y tejido procesado (aplicado a bioprótesis). A partir de las curvas tensión-deformación (σ-ε) obtenidas, se determinaron parámetros característicos tales como módulo elástico (E), tensión máxima (σ_{max}) y deformación a la tensión máxima ($\varepsilon_{\sigma max}$).

El análisis estadístico de los datos indica que E, σ_{max} y $\varepsilon_{\sigma max}$ son independientes de la dirección relativa del ensayo respecto al eje mayor del pericardio. Tanto E como σ_{max} presentan valores menores para las muestras de tejido procesado que para las de tejido madre y las conservadas en GA. En el primer caso, los valores medios varían entre 45 MPa y 75 MPa, y en el segundo, entre 9 MPa y 15 MPa. Las $\varepsilon_{\sigma max}$ varían entre 30 % y 45 %, con valores mayores para las muestras procesadas.

Sensibilidad de la ecuación de estado de Neumann a la incertidumbre en la determinación del ángulo de contacto

• Jonathan Maximiliano Schuster,[1,2,3] Carlos Enrique Schvezov,[3] Mario Roberto Rosenberger[1,3]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas, Químicas y Naturales - Universidad Nacional de Misiones*
[2] *Universidad Nacional del Alto Uruguay*
[3] *Instituto de Materiales de Misiones*

Uno de los métodos más utilizados para determinar la energía libre superficial (ELS) en sólidos es la ecuación de estado de Neumann (EEN), dicho método permite calcular la ELS a partir del valor del ángulo de contacto (AC) de un solo líquido sonda (de tensión superficial conocida), mientras que otros métodos requieren los valores de AC de dos o más líquidos sonda [1-3]. En general, el error absoluto asociado a la determinación experimental del AC sobre una superficie sólida es significativo alcanzando valores de 1º a 5º, por lo que resulta importante el estudio de la sensibilidad de la EEN a dicha incertidumbre experimental [4].

El análisis se realizó mediante la determinación del número de condición de la EEN (NCEEN), definido como el cociente entre el error relativo (ER) en la ELS del sólido y el ER en el AC (NCEEN$<$1: el ER se amortigua, NCEEN$=$1: el ER permanece igual y NCEEN$>$1: el ER se amplifica). Para ello se consideraron 11 líquidos sonda hipotéticos con tensión superficial de 25, 30, 35, 40, 45, 50, 55, 60, 65, 70 y 72.8 mJ/m^2 respectivamente y 130 valores de ángulo de contacto (desde 1º a 130º con incrementos de 1º). La EEN se calculó numéricamente utilizando el método de Newton-Raphson. Por otra parte, a partir del NCEEN se obtuvo una expresión que permitió analizar el comportamiento del ER en la ELS frente a la variación en el AC y al error absoluto en el AC, esto permitió analizar el caso donde el sistema experimental para medir AC tiene un límite de incertidumbre mínimo determinado.

Se encontró que el NCEEN aumenta al aumentar la tensión superficial del líquido sonda y al disminuir el valor de la ELS del sólido en cuestión. Además, se observó que para un valor de error absoluto fijo en el AC la cota mínima de ER en ELS es función del líquido sonda utilizado y crece con el aumento de la tensión superficial del líquido, como consecuencia práctica de esto se tiene que al determinar la ELS de un sólido determinado mediante dos líquidos sonda diferentes la incertidumbre en la ELS será mayor cuando se utilice el líquido con mayor tensión superficial.

Referencias:

[1] H Tavana and A W Neumann, Adv. Colloid Interface Sci. **132**, 1 (2007).
[2] J M Schuster et al, Procedia Mater. Sci. **8**, 732 (2015).
[3] D Y Kwok and A W Neumann, Adv. Colloid Interface Sci. **81**, 167 (1999).
[4] I Mohammed-Ziegler *et al.*, J. Adhes. Sci. Technol. **18**, 687 (2004).

Dinámica del agua y especies catiónicas en canales de conducción de membranas de Nafion mediante simulaciones computacionales

• Heber Andrada,[1,2] Luis Reinaudi,[3,4] Cecilia Gimenez,[5,6] Alejo Carreras[5,6]

[1] *IDAS-CONICET, Rio Cuarto*
[2] *Departamento de Química, Universidad Nacional de Río Cuarto*
[3] *Instituto de Investigaciones en Físico-Química de Córdoba*
[4] *Facultad de Ciencias Químicas - Universidad Nacional de Córdoba*
[5] *Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba*
[6] *Instituto de Física Enrique Gaviola, IFEG-CONICET, Argentina*

Uno de los componentes principales de las celdas de combustible con membrana de intercambio protónico (PEMFCs) es la membrana polimérica utilizada como electrolito, la cual debe presentar alta conductividad protónica, baja conductividad electrónica, baja permeabilidad al combustible, buenas estabilidades química y térmica, buenas propiedades mecánicas y un costo relativamente bajo, para su utilización en PEMFCs. El rendimiento de una PEMFC se encuentra directamente relacionado con el transporte de protones a través de la membrana, el cual a su vez depende del contenido y distribución de las moléculas de agua en dicha membrana. Por tal motivo, resulta de interés el estudio del comportamiento de las moléculas de agua y sus especies catiónicas dentro de los canales de conducción.
En este trabajo se estudia la distribución espacial de las moléculas de agua, mediante cálculos de funciones de distribución radial (RDF) para las distancias medias entre los átomos de oxígeno y azufre pertenecientes a los grupos sulfonato y los átomos de hidrógeno y oxígeno pertenecientes a las moléculas de agua. Para ello se realizan simulaciones computacionales para representar los dominios hidrofílicos en la membrana de Nafion, considerando diferentes grados de hidratación. Se utiliza el programa LAMMPS [http://lammps.sandia.gov] y se propone un modelo de canal cilíndrico de 5 nm de largo y 2 nm de radio, en el cual 40 grupos sulfónicos interactúan con diferentes cantidades de moléculas de agua. El potencial utilizado es un potencial reactivo desarrollado por Mahadevan y Garofalini [Mahadevan, T.S. y Garofalini, S.H., "Dissociative water potential for molecular dynamics simulations", J. Phys. Chem. B, 2007, 111, 8919-8927], que permite la ruptura y generación de enlaces químicos.
También se realiza un análisis del comportamiento dinámico de las moléculas de agua dentro del canal. Se observa que para $\lambda = 1$ todas las moléculas de agua se encuentran protonadas y se ubican preferentemente cerca de los grupos sulfonato. A medida que aumenta el contenido de agua comienzan a formarse diferentes especies protonadas (cationes hidronio solvatados), tales como $H_5O_2^+$, $H_7O_3^+$ y $H_9O_4^+$, que tienden a ubicarse en el centro del canal, mientras que las moléculas de agua comienzan a agruparse en las paredes del mismo.

Propiedades térmicas del llenado con líquido de un nanocanal: El efecto de revestir una pared con cepillos poliméricos

• Federico Condado,[1,2] Ignacio Urrutia,[1,2] Claudio Pastorino[2,3]

[1] *Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (CNEA-CONICET)*
[2] *Departamento de Física de la Materia Condensada, CAC, CNEA-CONICET*
[3] *INSTITUTO DE NANOCIENCIA Y NANOTECNOLOGIA -CONICET/CNEA- NODO CONSTITUYENTES*

La capacidad térmica de intercambiadores de calor en facilidades de generación eléctrica, reactores nucleares de generación IV y en disipadores en microprocesadores de alta potencia, debe aumentarse en el futuro. Estos desarrollos requerirán mayor densidad de energía y, por lo tanto, mejorar la tasa de transporte o disipación del calor. Es de gran interés realizar modificaciones de las superficies confinantes de líquido, a escala nanoscópica para mejorar la conductividad térmica de estos sistemas. En este trabajo, estudiamos las propiedades térmicas de un fluido confinado en un nano-canal bajo un gradiente de temperatura, utilizando simulaciones de dinámica molecular con modelos de grano grueso, para la descripción molecular. El canal, sometido a dos temperaturas diferentes en las paredes opuestas, se llena progresivamente de líquido, comenzando con líquido en contacto con una pared "fría", hasta tener una densidad de fluido alta en la pared opuesta (caliente). Se mide el flujo de calor en función del llenado para los casos de pared descubierta, y pared revestida de cepillos poliméricos flexibles y muy rígidos. Se comparan también una densidad de fijado muy baja y otra más alta. Se estudian los perfiles de densidad, temperatura, presión y tensiones interfaciales en función del llenado del nanocanal. Se encuentra un muy interesante comportamiento térmico, diferente al de una pared descubierta, en presencia de los polímeros fijados a la pared, especialmente cuando son semiflexibles con alta rigidez de flexión. Los polímeros modifican el flujo de calor.

Modelo dinámico en la formación de patrones de movilidad en poblaciones de bacterias

• Carolina Cogo,[1] Aníbal R. Lodeiro,[2] Augusto A. Melgarejo[1]

[1] *Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería, UNLP*
[2] *Instituto de Biotecnología y Biología Molecular -Facultad de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET*

A partir de un modelo crecimiento-difusión basado en un sistema acoplado de dos ecuaciones diferenciales a derivadas parciales, una representado el comportamiento de la población de bacterias y la otra representado el comportamiento de la concentración de quimioatrayentes, estudiamos la formación de patrones de densidad de bacterias en agar semisólido. Las bacterias tienen la capacidad de moverse en forma autopropulsada en este medio gracias a estructuras filamentosas denominadas flagelo bacteriano. La natación de las bacterias en agar semisólido se observa como la expansión de un halo de movilidad a partir de la colonia inicial de bacterias, formando patrones de densidad. Este patrón de densidad parece estar asociado a la quimiotaxis y a las interacciones entre bacterias. De entre las especies de bacterias más estudiadas se encuentran *Escherichia coli* y *Salmonella thypimurium*, las cuales forman patrones de anillos y puntos en agar semisólido.
En nuestro laboratorio estudiamos la bacteria *Bradyrhizobium diazoefficiens*, la cual posee dos sistemas de flagelos, uno subpolar (el cual es constitutivo) y otro lateral (el cual es inducible). La capacidad de expresar flagelos se encuentra relacionada con la disponibilidad de nutrientes y de oxígeno, entre otros factores. La presencia o no de alguno de estos flagelos resultaría en un patrón de movilidad diferente. Además, hemos observado que cepas derivadas más móviles presentan patrones de movilidad diferentes en agar semisólido, respecto de sus cepas salvajes. Para el estudio de los patrones de movilidad hemos usado básicamente dos parámetros de nuestro sistema de ecuaciones; por un lado, el coeficiente de difusión de las bacterias D_b y por el otro la respuesta al quimioatrayente α. A partir de estos dos parámetros hemos reproducido cualitativamente el patrón de movilidad para la cepa salvaje de *B. diazoefficiens*. A su vez, hemos calculado los patrones para las cepas mutantes: una sin flagelo subpolar y otra sin flagelos laterales.

Polvos nano y microestructurados de ZnO y ZnO:Cd para su uso en la degradación de azul de metileno: análisis de la eficiencia fotocatalítica de los polvos suspendidos e inmovilizados en sustratos de vidrio

• Martina Franco,[1] Oscar Marin,[1] Nadia Vega,[1] Monica Tirado,[2] Maria L Tereschuk,[3] David Comedi[1]

[1] *Nanoproject- LAFISO, INFINOA (CONICET-UNT), Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología, Universidad Nacional de Tucumán*
[2] *Nanoproject- LNPD, INFINOA (CONICET-UNT), Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología, Universidad Nacional de Tucumán*
[3] *Cátedra de Química Orgánica, Departamento de Ingeniería de Procesos y Gestión Industrial, INFINOA (CONICET-UNT), Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología, Universidad Nacional de Tucumán*

La contaminación ambiental es una problemática mundial y su magnitud aumenta cada día debido al aumento de las urbanizaciones, la intensiva producción industrial, el consumo y el estilo de vida de las personas. El avance de la nanotecnología permite la oportunidad para la fabricación de nanomateriales deseados con excelentes propiedades fotocatalíticas para tratar diversos tipos de contaminantes. Nanoestructuras de óxidos metálicos como TiO_2 y ZnO se han utilizado como fotocatalizadores para la degradación de contaminantes orgánicos en aire y agua [1] [2] [3]. Sin embargo, estudios recientes ubican a los óxidos metálicos nanoestructurados de origen antropogénicos como contaminantes emergentes, a los cuales se deben analizar rigurosamente dado que se encuentran presentes en los sistemas ambientales y aún no se han estudiado en profundidad su comportamiento en el ambiente y su toxicidad. Debido a esta problemática, se busca desarrollar métodos para evitar el volcado y fuga de las nanoestructuras fotocatalizadoras a los sistemas ambientales. Una de las estrategias más promisorias es la inmovilización de los catalizadores en diferentes sustratos. Con esta idea, se fabricaron nanoestructuras de ZnO y ZnO:Cd al 2% mediante el método hidrotermal seguido de un recocido a 300C para ser utilizados para la degradación de azul de metileno. Se estudiaron dos alternativas de degradación: polvos suspendidos e inmovilizados en sustratos de vidrio. Para la inmovilización se formularon suspensiones coloidales de las nanoestructuras en etilenglicol y dietanolamina, las cuales fueron depositadas sobre el vidrio. Las muestras se caracterizaron mediante espectroscopia Raman y de fotoluminiscencia para conocer su composición química y sus propiedades ópticas. La morfología fue estudiada mediante microscopia SEM. Se observo que posterior al recocido las muestras estaban compuestas por ZnO. El análisis de los corrimientos de las señales Raman sugirió la inclusión del Cd^{2+} dentro de la red de ZnO. Estos experimentos demostraron que las muestras recocidas fueron más eficientes para la degradación del azul de metileno, obteniendo un 96% de degradación en 40 minutos. Las muestras recocidas dopadas con Cd^{2+} mostraron una leve mejoría respecto al ZnO puro evidenciado por el valor de la constante cinética de pseudo primer orden. Si bien los polvos suspendidos mostraron mayor eficiencia que los inmovilizados, se consiguió la degradación del compuesto orgánico con ambas alternativas.

Referencias:

[1] Mya Khin *et al.*, Energy Environ. Sci. **5**, 8075 (2012).
[2] Flores *et al.*, RSC Adv. **4**, 41099 (2014).
[3] Le Pivert *et al.*, Microsystems Nanoengineering **5**, 57 (2019).

Transporte de bacterias benéficas en medios porosos

• Sofía Montagna,[1,2] Moniellen Pires Monteiro,[3] María Luisa Cordero,[3] Anibal R. Lodeiro,[4] Verónica I. Marconi[1,2]

[1] *Instituto de Física Enrique Gaviola (UNC-CONICET)*
[2] *Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación, Universidad Nacional de Córdoba*
[3] *Departamento de Física, FCFM, Universidad de Chile*
[4] *Instituto de Biotecnología y Biología Molecular -Facultad de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET*

El estudio de las bacterias de suelo es un tema muy amplio de investigación, se encuentran tantos procesos en las que están involucradas como multiplicidad de bacterias y cepas. Las hay nocivas y contaminantes, o por el contrario beneficiosas y utilizadas como biofertilizantes o en procesos de bioremediación de suelos. Estas razones dan relevancia al estudio de la dinámica y difusión bacteriana en medios porosos. Su visualización directa dentro del suelo es muy difícil de lograr, por lo cual su modelización, observación *in-silico* y la predicción de su comportamiento confinado son pasos necesarios y muy importantes. Con técnicas experimentales hemos logrado generar promisorios *soil on a chip*, dispositivos microfluídicos para el estudio en laboratorio con condiciones controladas. Para llegar a esto también es muy útil el estudio numérico previo y así lograr un modelo de suelo acorde al problema.
El estudio de las propiedades de transporte de una población de bacterias en suelos artificiales en particular puede ayudarnos a entender los procesos de biofertilización de la soja con bacterias *Bradyrizhobium diazzoefficiens*. En este trabajo presentamos simulaciones con dinámica de Langevin en medios porosos artificiales simples [Montagna et al, 2018]. Estudiamos propiedades de transporte con parámetros reales de distintas cepas de *B. diazzoefficiens* (diferente *set* de parámetros de movilidad) y medios variados. En un sistema con defectos circulares caracterizamos cómo la difusión varía con los radios de los obstáculos, los cuales pueden pensarse como las partículas que forman un suelo: arcilla, limo y arena. También mostramos cómo varía el tiempo que las bacterias se encuentran en las cercanías de un grano según su tamaño y cuáles son sus consecuencias directas en las propiedades de transporte.

Análisis comparativo de polímeros conductores porosos basados en porfirinas con aplicación en dispositivos de almacenamiento de energía

• Raúl Armando Rubio,[1] Javier Durantini,[1] Daniel Heredia,[2] Edgardo Durantini,[2] Luis Otero,[1] Miguel Gervaldo[1]

[1] *IITEMA-CONICET, Departamento de Química, Universidad Nacional de Río Cuarto-CONICET*
[2] *IDAS-CONICET, Departamento de Química, Universidad Nacional de Río Cuarto-CONICET*

En el desarrollo de nuevos materiales como parte constitutiva de electrodos aplicados a supercapacitores (SC), generalmente se busca obtener grandes superficies específicas y una porosidad adecuada. Las estructuras dendriméricas abiertas permiten la formación de un arreglo tridimensional tipo esponja, con una gran área de contacto entre el electrolito líquido y la superficie de la película. En este trabajo se diseñaron monómeros de porfirinas conteniendo diferentes metales centrales (Zn, Cu, Co), y sustituidas en las periferias con grupos carbazol y trifenilamina. Dichas películas de polímeros presentan propiedades electrónicas favorables que permiten su aplicación como material constitutivo en SC. Esta propiedad se basa en la pseudocapacitancia, la cual es generada por procesos rédox reversibles que se inducen en la película polimérica orgánica. Los grupos electropolimerizables fueron seleccionados debido a su capacidad para formar dímeros mediante síntesis electroquímica. Inicialmente los diferentes monómeros fueron caracterizados y electropolimerizados sobre electrodos de Pt e ITO por medio de voltametría cíclica. Los estudios electroquímicos y espectroelectroquímicos demostraron la presencia de unidades de dicarbazol y tetrafenilbencidina en las películas. Esto permitió proponer un mecanismo de electropolimerización basado en el acoplamiento de cationes radicales generados durante el ciclado electroquímico. Posteriormente dichas películas fueron evaluadas como material pseudocapacitivo presentando valores de capacitancias de hasta 200 F/g a densidades de corriente de 5 A/g, destacando también una buena retención de la capacitancia específica. Además, los electropolímeros exhibieron una muy buena retención de la capacitancia específica (más del 70%). Estos valores demuestran la potencial aplicación de las películas orgánicas electrogeneradas como materiales con aplicación en almacenamiento de energía donde se necesita una alta velocidad de carga-descarga.

Efecto de la concentración en soluciones acuosas de quercetin-3-rutinosido-sorbitol

• GRISELDA MONICA CORRAL,[1] MARIO GUILLERMO CAMPO,[1] KEVIN GABRIEL TOMAS[1]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad Nacional de La Pampa*

Utilizando el método de dinámica molecular clásica, se analiza el comportamiento y las características de hidratación de quercetin-3-rutinósido-sorbitol en solución acuosa. El glucósido flavonoide quercetin-3-rutinósido, también denominado Rutina, combina la Quercetina y el disacárido Rutinosa. La Rutina es un antioxidante natural, con propiedades antiinflamatorias, antibacterianas y antivirales, entre otras. El sorbitol es un polialcohol, muy utilizado como edulcorante, que forma parte del grupo de depresores de la actividad del agua. En este trabajo se estudia el comportamiento estructural y dinámico de Rutina en solución acuosa, en presencia y ausencia de sorbitol. Se desarrollan los modelos moleculares en la base AMBER99. Las cargas atómicas parciales se determinan con el módulo ESP de NWChem utilizando la base 6-31G. Las simulaciones computacionales se llevan a cabo con GROMACS. Como solvente se usa el modelo de agua SPC/E. La caracterización estructural con sus modificaciones y el comportamiento dinámico del solvente y de los solutos, se analizan mediante funciones de distribución radial, números de hidratación, estadística de formación de puentes de hidrógeno, RMSD y coeficientes de difusión. Se simulan soluciones de sorbitol con concentraciones entre 0 y 1M, para una concentración de Rutina de 0,135M. Se determinan y comparan los parámetros estructurales y dinámicos obtenidos en cada caso. Se obtiene una descripción estadística a escala molecular de la interacción Rutina - sorbitol - agua.

Camino de Solidificación de aleaciones Sn-Cu hipo e hiper-eutécticas

• Facundo Arriaga,[1] Osvaldo Fornaro,[1,2,3] Fernando Gabriel Lanzini[1,2]

[1] *Instituto de Física de Materiales Tandil. Facultad de Ciencias Exactas. Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires. Pinto 399 - 7000 Tandil*
[2] *CONICET*
[3] *CIFICEN (UNCPBA-CICPBA-CONICET), Pinto 399, 7000 Tandil, Argentina*

Las aleaciones con base Sn tienen un rol fundamental en el desarrollo de la electrónica, siendo el componente principal de las aleaciones utilizadas para la unión y soldadura de estos dispositivos. Históricamente las aleaciones más utilizadas para este fin fueron las Sn-Pb, pero debido a la contaminación involucrada con la producción y deposición de elementos conteniendo Pb, ha sido necesario buscar otros sistemas sin contenido de Pb (Lead Free Solders) [1-2]. Entre las candidatas a reemplazar el Sn-Pb se encuentran las aleaciones Sn-Cu, lo cual ha impulsado su investigación y caracterización en los últimos años [3].
En este trabajo se estudiaron las transiciones sólido-líquido y líquido-sólido para distintas composiciones hipoeutécticas e hipereutécticas en el rango 0.09 - 2,0% de Cu en peso. El estudio se realizó por medio de curvas de calentamiento/enfriamiento a tasas controladas, realizadas con un horno eléctrico bajo atmósfera controlada de Ar.
Los resultados se compararon con los obtenidos por medio de cálculo basado en el modelo CALPHAD (Calculation of PHAse Diagram), utilizando el software OpenCALPHAD (Open Source, Licencia GPL-v3). De esta forma se pudieron explicar fenómenos asociados a la transición líquido-sólido en las aleaciones de esta familia [4-6] en condiciones cercanas al equilibrio.

Referencias:

[1] Union Européenne. *Directive 2002/96/ec on waste electrical and electronic equipment (weee).* JO EU, **37**, 24 (2003).
[2] EU Directive. *Restriction of the use of certain hazardous substances in electrical and electronic equipment (rohs)*, Off. J. Eur. Communities **46**, 19 (2013).
[3] Morando C, Fornaro O, Garbellini O, and Palacio H. *Thermal properties of sn-based solder alloys*, J. Mater. Sci.: Mater. Electron. **25**, 3440 (2014).
[4] Spencer, PJ. *A brief history of calphad*, Calphad **32**, 1 (2008).
[5] Andersson JO, Helander T, Höglund L, Shi PF, and Sundman B. *Thermo-Calc and DICTRA, Computational tools for materials science*, Calphad **26**, 273 (2002).
[6] Sundman B, Kattner UR, Palumbo M, and Fries SG. *OpenCalphad-a free thermodynamic software*, Integr. Mater. Manuf. Innov. **4**, 1 (2015).

Caracterización de fuerzas activas en células vivas a partir del movimiento y la deformación de filamentos del citoesqueleto

• Julieta Wenger,[1] Alejandro Monastra,[2] Luciana Bruno[3]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*
[2] *Instituto de Ciencias - Universidad Nacional de General Sarmiento*
[3] *Instituto de Cálculo, Facultad de Cs. Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*

En células vivas, la presencia de fuerzas activas (i.e. motores moleculares) provoca fluctuaciones transversales en la forma de los microtúbulos que inducen correlaciones. En contraposición con las fluctuaciones térmicas, el pasaje de un estado del sistema (deformación del filamento) a otro no se realiza de manera azarosa, sino en direcciones privilegiadas, estableciéndose corrientes de probabilidad netas [1,2].
La hipótesis teórica principal es que las fuerzas activas actúan en regiones localizadas del filamento (puntos de anclaje), que se mantienen relativamente fijas en la escala temporal de un experimento. Sin embargo la intensidad de estas fuerzas, su "encendido" y "apagado", son procesos estocásticos.
En este trabajo se recuperaron las coordenadas de microtúbulos individuales a partir de imágenes de microscopía de fluorescencia de células melanóforas de Xenopus laevis. Las formas de estos filamentos se proyectaron en una base de modos normales flexurales, cuyas amplitudes se representan en un espacio de fases multidimensional. Se determinaron corrientes y circulaciones de probabilidad no nulas asociadas a las correlaciones de estas amplitudes, confirmando la presencia de fuerzas activas que mantienen al sistema fuera del equilibrio termodinámico.
Mostramos también resultados preliminares obtenidos a partir de simulaciones numéricas del sistema, que permitirían estimar valores de la magnitud y frecuencias características de las fuerzas activas.

Referencias:

[1] Battle, Christopher, *et al.*, *Broken detailed balance at mesoscopic scales in active biological systems*, Science **352**, 604 (2016).
[2] Gladrow, J., *et al.*, *Broken detailed balance of filament dynamics in active networks*, Phys. Rev. Lett. **116** 248301 (2016).

Teoría de condensación de contraiones para concentraciones finitas de polímero y sal

• Jorge Alberto Bertolotto,[1] Juan Pablo Umazano[1]

[1] *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad Nacional de La Pampa*

Para explicar las propiedades fisicoquímicas de polielectrolitos se suele aplicar la ecuación de Poisson-Boltzmann para calcular la distribución del potencial eléctrico y de iones en el entorno de los macroiones en solución acuosa. Una aproximación que tuvo bastante éxito en sus aplicaciones en el estudio de las propiedades coligativas de macromoléculas (presión osmótica, coeficientes de actividad, etc.) fue la teoría de condensación de contraiones de Manning [1,2]. Sin embargo, esta no pudo explicar los resultados experimentales de presión osmótica en soluciones acuosas de ADN en distintas concentraciones de NaCl. Schurr et al. [3], extendieron la formulación de Manning, empleando una teoría de unión entre macromoléculas e iones y un modelo de celdas para las soluciones de macroiones. Lograron ajustar las experiencias de presión osmótica del ADN, pero en sus cálculos hacen suposiciones sin sustento físico. En el presente trabajo se parte de la energía libre de Gibbs para una solución de macroiones lineales según la teoría de Manning, pero generalizada para cualquier concentración polimérica y salina en la solución, empleando un modelo de celdas. Se aplican las condiciones para que el sistema esté en equilibrio y se calcula la presión osmótica, para una solución de macroiones con las características del ADN. Se compara con los resultados experimentales de Raspaud et al. [4] y con los ajustes logrados por Hanssen et al. [5] aplicando la ecuación de Poisson- Boltzmann.

Referencias:

[1] G.S. Manning, Biophys. Chem. **7**, 95 (1977).
[2] M.O. Fenley, G.S. Manning, and K.O.Olson, Biopolymers. **30**, 1191 (1990).
[3] J.M. Schurr , and B.S. Fujimoto, J. Phys. Chem. B **107**, 4451 (2003).
[4] E. Raspaud, M. da Conceiçao, and F. Livolant, Phys. Rev. Lett. **84**, 2534 (2000).
[5] L. Hansen, P. Podgornik, V.A. Parsegian,V.A. Phys. Rev. E **64**, 021907 (2001).

Tráfico pesado de espermatozoides humanos

• Marina Palacio,[1] Matías A. Bettera Marcat,[1,2] Adolfo J. Banchio,[1,2] V. I. Marconi[1,2]

[1] *Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación. Universidad Nacional de Córdoba*
[2] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*

Actualmente los dispositivos microfluídicos son fuertemente usados para estudiar en laboratorio todo tipo de espermatozoides, en condiciones económicas, biocompatibles, y sobre todo bajo control [1] Nuestro equipo de trabajo ha contribuido sustancialmente a estos desarrollos en laboratorios argentinos especializados en reproducción humana desde hace unos diez años. En 2014 reportamos el primer biorectificador (bio-micro-ratchet) capaz de generar una corriente de espermatozoides humanos y gracias a ello, concentrarlos para futuras aplicaciones [2]. Y muy recientemente mostramos que espermatozoides humanos en condiciones ultraconfinidas disminuyen y recuperan su velocidad de nado al incidir en las predominantes superficies de los microdispositivos, con una buena concordancia entre modelo teórico y experimentos [3].
Este trabajo es parte de un proyecto que enfoca más allá de estudios en laboratorio, y busca contribuir a desarrollos tecnológicos, donde es necesario hacer dispositivos en tres dimensiones, en gran escala, y lo más económico posibles. Nuestros aportes han sido sustancialmente en dos dimensiones. Aquí presentamos aportes novedosos donde proponemos una manera de ir de modo muy sencillo de modelos en 2D a 3D, pero aún simulando en baja dimensión y bajo tiempo de CPU. En particular estudiamos y caracterizamos detalles del tráfico de espermatozoides en canales muy finos, los cuales hemos previamente mostrado que son los más eficientes para el transporte dirigido. Este desarrollo se motivó por problemáticas observadas en las aplicaciones. Con nuestras predicciones esperamos ofrecer propuestas mejoradas de geometrías óptimas y prometedoras para la transferencia tecnológica, que controlen y mejoren el transporte en largos y "necesarios" canales en microdispositivos tridimensionales.

Referencias:

[1] Nosrati, R., Graham, P., Zhang, B. *et al.*, *Microfluidics for sperm analysis and selection*, Nat. Rev. Urol. **14**, 707 (2017). DOI
[2] Guidobaldi, A. and Jeyaram, Y. and Berdakin, I. and Moshchalkov, V. V. and Condat, C. A. and Marconi, V. I. and Giojalas, L. and Silhanek, A. V. Phys. Rev. E **89**, 032720 (2014). DOI
[3] Bettera Marcat, M. A., Gallea, M. N., Miño, G. L., Cubilla, M. A., Banchio, A. J., Giojalas, L. C., Marconi, V. I. and Guidobaldi. Biomicrofluidics **14**, 024108 (2020). DOI

Simulación y pronóstico de incidentes de tránsito

• Marcelo Arlego,[1] Carlos Lamas,[1] Mauricio Matera,[1] Agustin Caputo[2]

[1] *Instituto de Física de La Plata, CONICET*
[2] *Facultad de Ciencias Exactas - Universidad Nacional de La Plata*

En este trabajo se presenta el diseño e implementación de un prototipo de asistente para pronóstico de estado de tránsito, con dos etapas bien definidas. La primera comprende un generador de datos sintéticos a partir de un modelo basado en agentes. La segunda etapa implementa el pronosticador propiamente dicho, entrenado a partir de los datos generados por el modelo de agentes. El prototipo se focalizará en pronósticos de flujo de tránsito en tramos de autopista.
En la primera etapa se desarrolla una simulación de un tramo de autopista o avenida con varias entradas y salidas. El objetivo es simular una situación realista, donde se parte de una imagen satelital de la geografía del lugar y la estructura de la autopista. A partir de ello se construye un modelo basado en agentes. Cada automóvil en la autopista es un agente que tiene atributos y reglas de acción, inspiradas en modelos físicos de tránsito. Para implementar la simulación se recrean primero situaciones simplificadas, utilizando modelos de agentes programados con herramientas de software libre como python. Luego, para llevar a cabo simulaciones más realistas, como las que se propone aquí, utilizamos software más especializado (anylogic). Una vez construido el simulador, se podrán recrear diversas situaciones, como embotellamientos o un retraso impuesto por un puesto de control en alguna arteria y el impacto que esto tiene sobre la red (local) simulada.
Para la segunda etapa de pronóstico se utilizan los datos simulados previamente. La ventaja de utilizar datos sintéticos realistas es que permite pasar por alto la toma de datos, que usualmente es costosa, lenta y en muchos casos escasa. Tener los datos permite concentrarse en las estrategias para poder obtener información a partir de los mismos. Existen muchas formas de hacer pronóstico a partir de datos históricos, o series temporales. Las formas más tradicionales se basan en métodos autorregresivos. Últimamente las técnicas de pronóstico basadas en redes neuronales (convolucionales y recurrentes, por ejemplo), también han ganado un lugar destacado en el área. En nuestra propuesta nos focalizaremos en los métodos autorregresivos, aunque cabe también la posibilidad de explorar técnicas basadas en redes. Testearemos el pronosticador en condiciones normales de tránsito y también bajo la presencia de alguna perturbación en el flujo en algún ramal, por ejemplo, generado por un choque. La performance del pronosticador con datos sintéticos es un paso previo importante para su implementación en un contexto real, con datos reales, según disponibilidad e interés.

Focos epilépticos y el rol de los ritmos neuronales: interacción a diferentes escalas espaciales y temporales

• Mauro Granado,[1] Monserrat Pallares Di Nunzio,[1] Fernando Montani[1]

[1] *Instituto de Física La Plata, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP - CONICET*

Estudios recientes de oscilaciones a frecuencias mayores a los 100 Hz en electroencefalogramas intracraneales (iEEG) relacionados con registros de epilepsia sugieren que dicha actividad neural oscilatoria y/o en forma de interacciones de la red neuronal puede desempeñar un papel muy importante en el desarrollo del fenómeno epiléptico. El estudio de estas oscilaciones de alta frecuencia (HFO) en los registros de iEEG como biomarcadores de la actividad epiléptica se ha centrado en la localización espacial de la zona epileptógena, en donde se ha sugerido de varias maneras que el incremento de la actividad de HFO en un momento determinado puede reflejar el inicio de actividad epileptógena y además poder caracterizar dicha actividad. Esto podría ser clínicamente útil especialmente debido a que el registro de HFO parece ser un biomarcador factible de la zona epileptogena. Por otro lado, la estructura de las series temporales del iEEG se compone de muchos ritmos neuronales que interactúan a diferentes escalas espaciales y temporales. Esta interacción suele denominarse acoplamiento de frecuencias cruzadas y consiste en acoplamientos transitorios entre varios parámetros de diferentes ritmos. Se ha planteado la hipótesis de que este acoplamiento es un mecanismo básico implicado en las funciones cognitivas. Por último, existen varios métodos para medir el acoplamiento de frecuencias cruzadas entre diferentes escalas espaciales determinadas por los diferentes canales de los electrodos intracreaneales. En particular, los métodos actuales sólo sirven para explorar dos ritmos a la vez, además de ser computacionalmente exigentes e imponer suposiciones sobre la naturaleza de la señal. En este trabajo presentamos un nuevo enfoque basado en estimaciones de la información mutua a través de cual podemos caracterizar la interacción de las diferentes zonas espaciales utilizando datos empíricos de señales basales, preictales, ictales y postictales. Esta metodología de mecánica estadística y física no lineal nos permitirá establecer las posibles zonas de redundancia, independencia y sinergia en la transmisión de la información de forma de mejorar la detección de las diferentes zonas espacio temporales que dan lugar a la generación de los focos epilépticos.

Simulación de sistemas dinámicos continuos con Sci Lab

• Silvia Navarro,[1] Gustavo Adolfo Juarez,[2] María Luz Quiroga,[2] Deborah Turraca,[2] José Salim Rosales[2]

[1] *Debe ingresar al menos una filiación.*
[2] *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad Nacional de Catamarca*

El presente trabajo se desarrolla dentro del marco de las actividades relacionadas a las aplicaciones fisicas, procurando implementar soluciones en la situacion sanitaria presente a nivel mundial, en donde la busqueda de resultados en practicas de laboratorio se ven impedidas ante la presencialidad. Por ello la posibilidad de la modelización matematica acompañada de la simulacion se preve como una alternativa para analizar comportamientos. Aqui se estudia el caso del sistema masa resorte desde el comportamiento bajo observaciones cotidianas hasta la modelizacion matematica y su simulacion bajo sistemas dinamicos continuos realizados con software libre. El aporte de la modelizacion permite analizar expresiones matematicas y sus comportamientos mediante la simulacion grafica. Como la fisica no escapa como disciplina para aplicar modelos matematicos, aqui pretendemos mencionar la implementacion, dificultades y resultados de la modelizacion matematica y su simulacion mediante la implementacion del software libre Sci Lab, empleando conceptos fisicos dentro de la actividad de laboratorio virtual. Comenzando con el tipico problema de una masa sujeta a un punto fijo mediante un resorte horizontal, se analiza el comportamiento de la masa luego de ser retirada o acercada al punto fijo al ser sometida a una fuerza, con y sin resistencia a la superficie que la contiene, identificando la expresión matematica que la representa. Con tal expresion como modelo se simula con el software libre Sci Lab.

Simulación computacional y aproximación teórica aplicada a la adsorción de hidratos de clatratos

• Fabricio Orlando Sanchez Varretti,[1] Pablo Jesus Longone,[2] Fernando Manuel Bulnes,[2] Antonio José Ramirez Pastor[2]

[1] *Facultad Regional San Rafael - Universidad Tecnológica Nacional*
[2] *Instituto de Física Aplicada,CONICET-UNSL*

Los hidratos de clatrato, también llamados hidratos de gas, son compuestos similares al hielo que consisten en especies gaseosas contenidas dentro de una red cristalina de moléculas de agua. Esta red da lugar a la formación de cavidades donde las moléculas pueden ser adsorbidas. A pesar de los esfuerzos teóricos dedicados a comprende la termodinámica de los hidratos de clatrato aún no se dispone de un tratamiento mecánico estadístico exacto de este problema, por lo que el uso de simulaciones por ordenador aparece como una forma relevante de estudiar estos sistemas. Aquí presentamos nuevos desarrollos basados en el cálculo exacto de los estados de adsorción en sistemas pequeños. Sobre la base de este sencillo modelo teórico esperamos contribuir a una mejor comprensión de un sistema regido por un gran número de parámetros y cuyo tratamiento teórico y experimental no es sencillo de abordar.

Modelos semi-empíricos de estados cerebrales inducidos farmacológicamente

• Juan Pablo Fiorenza,[1] Yonatan Sanz Perl,[2] Carla Pallavicini,[3,4] Enzo Tagliazucchi[2]

[1] *Departamento de Fisica, FCEyN, UBA*
[2] *Instituto de Física de Buenos Aires, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales CONICET- Universidad de Buenos Aires*
[3] *Fundación para la Lucha contra las Enfermedades Neurológicas de la Infancia*
[4] *Instituto de Fisica de Buenos Aires y Departamento de Fisica, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires*

En la investigación en neurociencia se ha propuesto el uso de sustancias psicoactivas, entre ellas los psicodélicos, para el estudio de la consciencia debido a los efectos agudos que estos producen sobre ella. En el presente trabajo, se estudian las similitudes que producen en la actividad global del cerebro drogas como la dietilamida de ácido lisérgico (LSD), la psilocibina, el N,N-dimetiltriptamina (DMT) y la ketamina. Para ello, se ajustaron datos de resonancia magnética funcional (fMRI) y de imágenes del tensor de difusión (DTI) utilizando un modelo fenomenológico que da cuenta de la transición entre una dinámica asincrónica y oscilatoria; además de permitir describir de manera integrada estos dos registros (i.e. fMRI y DTI).
Dicha transición es capturada por un parámetro de bifurcación local, presente en el modelo y asociado a cada región de interés en la cual es parcelado el cerebro, el cual fue ajustado utilizando priors que permiten agrupar dichas regiones basándonos en redes funcionalmente coherentes; cada una de estas representando un parámetro a ajustar. Este ajuste, fue contrastado con priors que poseían el mismo número de grupos, pero no informados anatómicamente, con los cuales se combinaron las regiones de interés observándose que el mejor ajuste correspondió al caso anatómicamente informado.
Los parámetros óptimos obtenidos luego del ajuste permitieron observar una menor distancia, tomándose esta como la distancia euclídea entre estos, entre el LSD, la psilocibina y el DMT. A su vez, se observa una convergencia del modelo con diferencias y similitudes en la acción de estas sustancias para las distintas redes en las cuales fueron agrupadas las regiones de interés.
De este trabajo, se pudo concluir que constreñir el espacio de parámetros utilizando priors informados anatómicamente presentaron una mejora en la descripción de la actividad global del cerebro. Además, este modelo permitió estudiar las similitudes entre la acción de distintas drogas frente a una transición entre un régimen asincrónico de actividad cerebral y uno oscilatorio.

Análisis multifractal de los casos diarios de COVID-19 en Argentina

• Sebastián Jaroszewicz,[1] Maria Pia Beccar Varela,[2] Osei K. Tweneboah,[3] Maria Cristina Mariani[2]

[1] *Centro Atómico Constituyentes, Comisión Nacional de Energía Atómica*
[2] *Department of Mathematical Sciences, The University of Texas at El Paso*
[3] *School of Theoretical and Applied Science, Ramapo College of New Jersey.*

El Síndrome respiratorio agudo severo Coronavirus SARS-CoV2, nombrado también nuevo coronavirus es un miembro de la familia coronavidae. Los primeros casos humanos de COVID-19, la enfermedad causada por este virus fueron informado por primera vez en la ciudad de Wuhan, China, en diciembre de 2019 . Rapidamente se reportaron casos en todo el mundo. En Argentina el primero se confirmó a principios de marzo de 2020. El propósito de este trabajo es estudiar las propiedades de escala de la serie temporal constituída por los casos diarios reportados de COVID-19 en Argentina, mediante el análisis multfifractal . Para hacer fre nte al hecho de que los datos son no estacionarios y la muestra bastante pequeña, hacemos uso del análisis de fluctuación multifractal sin tendencia (MFDFA). Este método, desarrollado por Kanterlhardt et. al. [1] se ha convertido en una técnica ampliamente utilizada para la determinación de las propiedades de escalamiento multifractal y, para la detección de correlaciones de largo alcance en series de tiempo no estacionarias. Mediante la aplicación del MFDFA examinamos la evidencia de la presencia de multifractalidad en la serie estudiada y la comparamos con la de otros países con diferentes características demográficas y en los que se han aplicado diferentes políticas para afrontar la pandemia. Por úlitmo estudiamos las fuentes de la multifractalidad en la cantidad de contagios.

Referencias:

[1] Kantelhardt, J.W., Zschiegner, S.A., Bunde, E.K., Havlin, S., Bunde, A. and Stanley, H.E. *Multifractal detrended fluctuation analysis of nonstationarytime series*, Phys. A **316**, 87 (2002).

Stochastic model for football's collective dynamics

• Andrés Chacoma,[1] Nahuel Almeira,[1] J.I. Perotti,[1] O.V. Billoni[1]

[1] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*

In this paper, we study collective interaction dynamics emerging in the game of football (soccer). To do so, we surveyed a database containing body-sensor traces measured during three professional football matches, where we observed statistical patterns that we used to propose a stochastic model for the players' motion in the field. The model, which is based on linear interactions, captures to a good approximation the spatiotemporal dynamics of a football team. Our theoretical framework, therefore, can be an effective analytical tool to uncover the underlying cooperative mechanisms behind the complexity of football plays. Moreover, we showed that it can provide handy theoretical support for coaches to evaluate teams' and players' performances in both training sessions and competitive scenarios.

El proceso de aprendizaje como un sistema complejo: factores asociados al desempeño académico en contextos de presencialidad y virtualidad

• Fátima Velásquez-Rojas,[1,2] Jesús E. Fajardo,[3] Daniela Zacharias,[4] Fabiana Laguna[5]

[1] *Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata*
[2] *Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos, CONICET, UNLP*
[3] *Centro Atómico Bariloche - CONICET, Comisión Nacional de Energía Atómica*
[4] *Universidad Nacional del Comahue*
[5] *Grupo de Física Estadística e Interdisciplinaria, Centro Atómico Bariloche - CONICET*

Debido a la pandemia de COVID-19, el aula tal como la conocemos cambió y trajo consigo enormes desafíos para todos los actores del proceso educativo, quienes debieron sobreponerse a múltiples dificultades y adaptarse a una nueva realidad en la que la incorporación de nuevas estrategias y herramientas resultó imprescindible. En este trabajo estudiamos el proceso de adquisición de conocimientos en dos contextos diferentes: el presencial (antes del inicio de la pandemia) y el virtual (durante el confinamiento), para un caso particular en la educación superior. Para ello desarrollamos un modelo basado en datos recabados a partir de una serie de encuestas. Los resultados del modelo se contrastan con información sobre el desempeño académico. Los parámetros que mejor describen la situación observada fueron obtenidos utilizando Redes Neuronales Artificiales y un método de Regresión Lineal Múltiple. Observamos que el paso a la virtualidad produjo una disminución en la motivación para aprender. Mostramos que, en todos los casos, la interacción con los docentes es de suma importancia en el proceso de adquisición de conocimientos. Finalmente, encontramos que la estructura de la red de contactos emergente de la interacción entre pares presenta características muy diferentes en ambos contextos.

Cuantificación de la dinámica de la señal y fase de ritmos oscilatorios de alta frecuencia en registros de crisis epiléptica

• Mauro Granado,[1] Monserrat Pallares Di Nunzio,[1] Fernando Montani[1]

[1] *Instituto de Física La Plata, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP - CONICET*

La epilepsia es una enfermedad neurológica crónica que afecta a 1 de cada 200 personas. En el 30% de los afectados hay una respuesta negativa al tratamiento farmacológico, donde este tipo se denomina epilepsia refractaria. En este caso se indica como tratamiento una intervención quirúrgica, donde el éxito consiste en encontrar la zona cortical responsable de la generación de crisis, denominada zona epileptogénica. En este trabajo se estudiaron los registros eléctricos de esta zona en pacientes con epilepsia refractaria con el fin de explorar los mecanismos oscilatorios subyacentes durante el proceso epiléptico. Para ello, se estudió la actividad neural para el período basal (alejado temporalmente de la convulsión) y preictal (inmediatamente antes de la convulsión) mediante el registro de electrodos intracerebrales para lograr una mayor resolución del potencial de campo local. Se discernió la dinámica intrínseca de los dos tipos de registros usando un análisis de ventanas temporales para las distintas bandas de frecuencias. La causalidad de estos registros se cuantificó a través de herramientas de teoría de la información y de la metodología de permutación de Bandt-Pompe, que mostraron distinciones en la transmisión de información de las oscilaciones cerebrales en el rango de altas frecuencias y en la correlación entre la fase y amplitud de la señal para dichos cuantificadores.

Efectos de las nuevas variantes del SARS-CoV-2: Modelo epidemiológico geo-estocástico aplicado a la pandemia

• Nadia L. Barreiro,[1] Tzipe Govezenski,[2] Cecilia Ileana Ventura,[3,4,5] Matías Núñez,[4,6,7] Pablo G. Bolcatto,[1,4,8,9] Rafael A. Barrio[10]

[1] *Instituto de Investigaciones Científicas y Técnicas para la Defensa*
[2] *Inst. de Investigaciones Biomédicas, UNAM, México*
[3] *Universidad Nacional de Río Negro*
[4] *Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas*
[5] *Gerencia de Física, Centro Atómico Bariloche, CNEA*
[6] *INIBIOMA, Univ. Nac. del Comahue, Bariloche*
[7] *Departamento Materiales Nucleares, Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA)*
[8] *Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Argentina*
[9] *Instituto de Matemática Aplicada del Litoral*
[10] *Instituto de Física- UNAM , México.*

A la fecha, la COVID-19 ha producido millones de fallecimientos alcanzando cada región del planeta. El desarrollo de vacunas ha generado nuevas esperanzas respecto al control de la pandemia. Sin embargo, el surgimiento de variantes de interés, más infecciosas y parcialmente inmunes a las vacunas, representa un nuevo desafío para la humanidad. Es de interés conocer los potenciales efectos de las nuevas cepas en la propagación del virus. Con este propósito, se desarrolla un modelo epidemiológico basado en trabajos previos[1-3] que permite estudiar su propagación teniendo en cuenta diferentes parámetros epidemiológicos y sociales. El modelo se basa en un sistema compartimental tipo SEIR que utiliza un mapa matemático con ecuaciones discretas demoradas en el tiempo. En este caso, el modelo se modificó para incluir las nuevas variantes considerando sus diferentes parámetros epidemiológicos (coeficiente de transmisión y períodos de incubación, infección e inmunidad). La expansión geográfica del virus se desarrolla utilizando un algoritmo de Montecarlo que permite establecer una movilidad aleatorizada. Gracias a ello es posible considerar las medidas gubernamentales que restringen la movilidad de las personas reduciendo la probabilidad de contagio. Adicionalmente, el modelo tiene en cuenta tanto la distribución de la densidad poblacional como las conexiones entre ciudades.
En primera instancia, se mostrarán resultados del modelo aplicados a un área geográfica homogénea haciendo un estudio de los parámetros involucrados y su influencia en la propagación del virus. Adicionalmente, se tendrá en cuenta la posibilidad de que una persona contraiga más de una variante y se estudiará cómo este hecho podría influir en la competencia entre las diferentes cepas por la población susceptible. Finalmente se mostrarán resultados preliminares de la aplicación del modelo en áreas geográficas conocidas y se compararán los resultados con datos oficiales.

Referencias:

[1] R.A. Barrio, K.K. Kaski, G.G.Haraldsson, T.Aspelund, and T.Govezensky, Phys. A **582**, 126274 (2021).
[2] N.L.Barreiro, T.Govezensky, P.G. Bolcatto, and R.A. Barrio, Sci. Rep. **11**, 10024 (2021).
[3] N.L. Barreiro, C.I. Ventura, T. Govezensky, M. Núñez, P.G. Bolcatto, and R. A. Barrio, arXiv

Percolación Sitio-enlace en Redes Kagome Bidimensionales: Simulación Numérica y Modelo Analítico

• M. I. Gonzalez Flores,[1] Auro Anibal Torres,[2] Walter Lebrecht,[1] Antonio J. Ramirez Pastor[2]

[1] *Departamento de Ciencias Físicas - Universidad de La Frontera, Temuco, Chile*
[2] *INFAP-Universidad Nacional de San Luis*

Se presentan resultados de simulación numérica y de modelación analítica del problema de percolación sitio-enlace para redes de kagome bidimensionales. Motivados por consideraciones de conectividad inter clusteres, se han considerado dos esquemas de conexión entre sitios (S) y enlaces (B) (denotados como S-AND-B y S-OR-B). En S-AND-B (S-OR-B), dos puntos están conectados si una secuencia de sitios y (o) enlaces ocupados los une. Se usó simulación suplementada con un análisis de escaleo de tamaño finito, y una aproximación analítica, para determinar los contornos de fase entre las regiones percolantes y no percolantes, además del diagrama de fase del sistema en el espacio (ps, pb). En el caso del modelo S-AND-B, los resultados obtenidos están en excelente acuerdo con predicciones numéricas y teóricas previas. En el caso del modelo S-OR-B, se reporta la curva límite que separa las regiones percolantes y no percolantes.

Difusión y modelos SIR para COVID19

• Juan Mauricio Matera,[1] Carlos A. Lamas,[1] Marcelo Arlego,[1] Nicolás Grandi[1]

[1] *Instituto de Física La Plata, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP - CONICET*

Formulamos un modelo SIR acoplado a un fenómeno de difusión sobre una red de nodos, con el fin de obtener información sobre la progresión geográfica de la epidemica de COVID19. Discutimos diferentes maneras de estimar la tasa de contagio efectiva a partir de los datos disponibles.

Detección de escalas en ADN extracromosomal

• Sebastián Jaroszewicz,[1] Maria C. Mariani,[2] Osei K. Tweneboah,[2] Maria P. Beccar-Varela[2]

[1] *Centro Atómico Constituyentes, Comisión Nacional de Energía Atómica*
[2] *University of Texas at El Paso*

En este trabajo presentamos un estudio de las correlaciones estadísticas presentes en genomas mitocondriales y de cloroplastidos. Aplicando los métodos de análisis de entropía de difusión y el *detendred fluctuation analysis* estimamos el valor del exponente de Hurst. Comparamos los exponentes de escala obtenidos por ambos métodos para tres diferentes conjuntos de genomas diferentes: ADN mitocondrial de organismos pertenecientes a los reinos plantae y animalia y ADN de cloroplasto. Encontramos una amplia variedad de comportamientos que se apartan de las estadísticas de Levy anteriormente propuestas para las secuencias de ADN.

Evacuaciones de Emergencia con Presencia de Grupos Sociales

• Eric Rozan,[1] Guillermo Frank,[2] Fernando Cornes,[1] Ignacio Sticco,[1] Claudio Dorso[1,3]

[1] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, 1428 Buenos Aires, Argentina.*
[2] *Unidad de Investigación y Desarrollo de las Ingenierías, Universidad Tecnológica Nacional Facultad Regional Buenos Aires, Av. Medrano 95, 79 Buenos Aires, Argentina*
[3] *Instituto de Física de Buenos Aires, Pabellón 1, Ciudad Universitaria, 128 Buenos Aires, Argentina.*

Las evacuaciones de emergencia de personas en estado de pánico han sido objeto de estudio por investigadores en diversas áreas. En nuestro país, una de las últimas tragedias con gran relevancia fue la ocurrida en Cromagnon en 2004, iniciada con un incendio que desató el pánico y dejó un saldo de 194 muertos y 1432 heridos. Uno de los modelos más empleados para describir la dinámica de multitudes es el Modelo de Fuerza Social (SFM), en el cual el movimiento de cada individuo se debe a una combinación de fuerzas socio-psicológicas y físicas, que se basan en observaciones sobre el comportamiento social de los individuos [1]. El SFM permite estudiar la dinámica microscópica de las evacuaciones de emergencia. Además de considerar comportamientos individuales, diversos autores remarcan que deben considerarse comportamientos debidos a los lazos afectivos que existen entre miembros de distintos grupos sociales, como por ejemplo el vínculo entre colegas o entre parejas. En nuestras simulaciones consideramos estos vínculos afectivos incluyendo una fuerza de atracción al SFM, como se ha propuesto anteriormente [2]. En esta presentación mostraremos cómo calibramos la intensidad de los lazos afectivos en el SFM con datos experimentales publicados [3], y cómo se modifican las evacuaciones de emergencia al variar la intensidad de los lazos afectivos y el nivel de ansiedad de los individuos. Luego, describiremos la dinámica microscópica que está detrás de esos cambios. Observamos que las evacuaciones se ven entorpecidas por la presencia de los grupos, aunque encontramos rangos en los que aumentar los lazos afectivos puede mejorar la evacuación.

Póster candidato al premio Másperi

Palabras clave: Dinámica peatonal / Simulaciones computacionales / Estructuras sociales

Referencias:

[1] D. Helbing, I. Farkas and T. Vicsek. *Simulating dynamical features of escape panic*, Nature **407**, 487 (2000).
[2] G. A. Frank and C. O. Dorso. *Panic evacuation of single pedestrians and couples*, Int. J. Mod. Phys. C **27**, 1 (2016).
[3] Z. Yucel, F. Zanlungo, C. Feliciani, A. Gregorj and T. Kanda. *Identification of social relation within pedestrian dyads.* PLoSONE **14**, e0223656 (2019).

Caracterización de frentes de crecimiento de colonias de células tumorales mediante el formalismo de interfases auto-afines

• Miguel Angel Pasquale,[1] Claudio Maximiliano Horowitz[1]

[1] *Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), CONICET - UNLP*

Los mecanismos de procesos fisiológicos como la morfogénesis y reparación de tejidos, o los patológicos tales como la propagación de ciertos tumores, se describen comúnmente en término de cambios moleculares a nivel celular, en tanto que la dinámica global de estos procesos es mucho menos investigada. En los sistemas biológicos la organización y los fenómenos cooperativos generan sistemas supramoleculares con propiedades y funciones distintas a las que de cada individuo. El formalismo de interfases auto-afines permite clasificar frentes, de naturaleza muy diferentes, por medio de la evolución espacial y temporal de unas pocas magnitudes asociadas al conjunto del frente. Este formalismo da lugar a una clasificación en clases de universalidad y en ecuaciones diferenciales estocásticas asociadas a las mismas. En este trabajo se estudia las características del frente de crecimiento o interfase de colonias de células A549, de adenocarcinoma alveolar humano. Las colonias han sido generadas sobre substratos con microcanales de poliestireno, mediante máscaras apropiadas. Estas máscaras se han dispuesto de manera de obtener frentes formando distintos ángulos respecto a la dirección de los microcanales. Por medio de un análisis detallado de la dependencia de la rugosidad de los frentes de crecimiento con el tamaño del sistema y con el tiempo, de la velocidad de desplazamiento de la interfase a distintos ángulos de inclinación, y de la función de correlación espacial altura-altura del frente hemos podido determinar experimentalmente: i) el carácter KPZ del frente de crecimiento de la colonia, ii) el valor del coeficiente no-lineal, y la relación entre el coeficiente de difusión y el de intensidad del ruido de la ecuación estocástica asociada a la clase de universalidad KPZ.

Interacciones adsorbato-adsorbato entre moléculas monoatómicas en un sustrato unidimensional, aproximación de racimo

• Fabricio Orlando Sanchez Varretti,[1] Antonio José Ramirez Pastor[2]

[1] *Facultad Regional San Rafael - Universidad Tecnológica Nacional*
[2] *Instituto de Física Aplicada,CONICET-UNSL*

La adsorción de monómeros que interactúan en superficies heterogéneas unidimensionales se estudia combinando la simulación de Monte Carlo y el modelo teórico de aproximación de racimos. En algunos casos derivamos las cantidades relevantes de la función de partición. El sustrato se modela como una red unidimensional de parches heterogéneas con dos energías de adsorción diferentes ε_1 , ε_2 ; estos parches se distribuyen alternativamente. Dos tipos de partículas son utilizadas (A y B) y se incluye la mezcla de estas partículas del gas adsorbido lo que aumenta enormemente la complejidad del sistema. Se discute la validez de la aproximación de racimos. Los resultados pueden eventualmente ser aplicables a la adsorción de moléculas en sistemas de baja dimensión como los nanotubos de carbono.

Proceso de intercambio de CO2-CH4 en clatrato hidratos sI: cálculo de las funciones termodinámicas utilizando un modelo de gas de red 2D flexible y simulaciones de Monte Carlo

• Pablo Longone,[1] Antonio josé Ramirez-Pastor[1]

[1] *Universidad Nacional de San Luis, Depto de Física e Instituto de Física Aplicada*

Se utiliza un modelo de gas de red flexible en 2D, mediante simulaciones de Monte Carlo, para estudiar el proceso de intercambio de CO2 / CH4 en clatratos hidratos sI. En este marco, se muestra el comportamiento del cubrimiento de cavidades como función de la energía libre de Helmholtz, la entropía y el grado de deformación de la estructura sI. Para llevar adelante este estudio, se consideraron dos situaciones diferentes según el valor de las interacciones entre especies huésped y el agua. En el caso de los clatratos hidratos ideales (interacciones entre especies y agua nulas) se realiza un análisis detallado que nos permite interpretar el mecanismo físico correspondiente al proceso de intercambio: El aumento de la entropía de la especie CO2 por encima del CH4 en todo el rango de cubrimiento de cavidades. Como consecuencia, el motor que impulsa el proceso de desplazamiento del CH4 por el CO2 es la entropía y no la energía de interacción entre especies.

Adsorción de un metal sobre otro: simulaciones de Monte Carlo y percolación

• P.M. Centres,[1] M.C. Gimenez[2]

[1] *INFAP, CONICET, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales, Universidad Nacional de San Luis*
[2] *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*

En electroquímica, la adsorción de una monocapa metálica sobre una superficie de otro metal resulta importante para el estudio de catálisis y de la formación de aleaciones. Se realizaron simulaciones de Monte Carlo gran canónicas y canónicas empleando un modelo reticular para simular adsorción de un metal sobre la superficie (100) de otro metal fcc (Ag, Au o Pt). Para el cálculo de energías se empleó el método del átomo embebido y potenciales de a pares. Así se estudiaron isotermas de adsorción, cantidad media de vecinos, la formación de islas y las concentraciones que determinan una transición de fase geométrica. En relación a esto último, se analizaron los exponentes críticos y diagramas de fase separando las regiones percolantes de las no percolantes a diferentes temperaturas. Los diagramas de fase de umbral de percolación en función de la temperatura mostraron un comportamiento cualtitativamente diferente para el caso de potenciales de a pares y para los casos de potenciales de muchos cuerpos, teniendo en cuenta interacciones con primeros, segundos y terceros vecinos. La riqueza de comportamiento para estos últimos casos, se puede deber a la no linealidad de las interacciones laterales.

Influencia de la modelización del adsorbente en la caracterización de sólidos mesoporosos

• Rodrigo Nahuel Delgado Mons,[1] Valeria Cornette,[1] Juan Pablo Toso,[1] Raul Lopez[1]

[1] *Instituto de Física Aplicada,CONICET-UNSL*

El objetivo del presente trabajo es analizar cómo influye la modelización del adsorbente a la hora de caracterizar sólidos mesoporosos a partir de sus correspondientes isotermas de adsorción. Los datos experimentales corresponden a isotermas de adsorción sobre una muestra de MCM41 para dos gases diferentes: N2 a 77 K y Ar 87,3 K. Como herramienta teórica se cuenta con cuatro bancos de isotermas monoporo obtenidas por simulación de Monte Carlo (GCMCS) para dos tipos de geometría de poro distintas. Mediante el ajuste teórico experimental se obtienen las correspondientes PSDs (Pore Size Distributions) de cada banco y, además, se obtienen las PSDs correspondientes a bancos mixtos creados a partir de los bancos individuales, con las cuales se realiza un análisis comparativo en donde se busca estudiar como una mejor aproximación en la modelización del adsorbente puede influir en la caracterización de un sólido mesoporoso.

Más de una década de Radioactive Particle Tracking en Argentina: resultados relevantes y perspectivas futuras

• Gabriel Salierno,[1,2,3] Mauricio Maestri,[2,3] Julia Picabea,[2,3] Miryan Cassanello,[2,3] Cataldo De Blasio,[1] María Angélica Cardona,[4,5,6] Daniel Hojman,[4,5] Héctor Somacal[6]

[1] *Faculty of Science and Engineering, Åbo Akademi University, Rantakatu 2 - 65100 - Vaasa, Finland*
[2] *Departamento de Industrias, FCEN, UBA*
[3] *ITAPROQ - CONICET*
[4] *Laboratorio de Diagnósticos por Radiaciones, Departamento de Física Experimental, CNEA*
[5] *CONICET*
[6] *Escuela de Ciencia y Tecnología, Universidad de San Martín*

La aplicación de técnicas de tomografía industrial, como el seguimiento de partículas radiactivas (Radioactive Particle Tracking - RPT), es valiosa para extraer información macroscópica de regímenes de flujo subyacentes en condiciones que se encuentran con frecuencia en muchos procesos industriales, que son difíciles de obtener por otros medios debido a la compleja reología y opacidad. Los datos tomográficos son beneficiosos para comprender la dinámica de los reactores industriales y validar simulaciones para describir flujos multifásicos. Estamos trabajando activamente para obtener más beneficios de los datos recopilados durante más de diez años de colaboración conjunta entre CNEA y Dto. Industrias (FCEyN - UBA). Recientemente, utilizamos nuestros datos experimentales para verificar y validar modelos usando el software de código abierto CFDEM (DCS Computing GmbH, Linz, Austria). Se analizó con éxito la aplicabilidad de diferentes modelos de interacción y fuerza para simular sistemas fluidizados sólido-líquido en diferentes condiciones. Además, aplicamos la teoría de la información para explotar aún más los datos recopilados para comprender mejor el fenómeno de fludización, que tiene múltiples aplicaciones industriales y es de gran interés académico.

Dinámica de Partículas en Turbulencia de Ondas

• Tomas Ferreyra,[1] Paula Sanchez,[1] Pablo Cobelli[2]

[1] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*
[2] *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires and Insituto de Fisica de Buenos Aires, CONICET, Ciudad Universitaria, Buenos Aires 148, Argentina*

En este trabajo se presenta un estudio experimental de la dinámica de fibras flotadoras en un campo de ondas turbulento, empleando técnicas de profilometría de alta resolución espacio-temporal junto con velocimetría por seguimiento de partículas. Se muestran resultados preliminares de los códigos desarrollados para la detección y posterior análisis de las imágenes obtenidas en el laboratorio, así como la validación estadística de los algoritmos diseñados.

Recuperación asistida inyectando ferrofluidos en medio poroso bidimensional

• Ana Beatriz Fossati,[1,2,3] Yanina Lucrecia Roht,[4] Irene Ippolito,[4] Silvia Elena Jacobo[1,2,3]

[1] *Facultad de Ingeniería - Universidad de Buenos Aires*
[2] *Laboratorio Químico de Materiales Magnéticos Aplicados a la Ingeniería*
[3] *Instituto de Química Aplicado a la Ingeniería*
[4] *Grupo de Medios Porosos, Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires*

Luego de la recuperación primaria y secundaria de petróleo, queda entre el 60-80% del crudo entrampado en el yacimiento. Por ello, existen numerosas investigaciones basadas en la inyección de sustancias en el pozo para aumentar el factor de recobro, dando lugar a los métodos de recuperación mejorada (EOR). Si bien suele inyectarse químicos (CEOR), tanto polímeros como surfactantes, éstos sufren degradación en condiciones de pozo debido a la alta salinidad y temperatura. Por este motivo, el empleo de nanopartículas es una buena alternativa ya que no sufren la degradación originada en polímeros y surfactantes. Además, por su pequeño tamaño acceden al crudo residual ubicado en las gargantas porales del reservorio, logrando reducir la tensión interfacial agua-petróleo, modificar la mojabilidad de la roca y cambiar la viscosidad del fluido de inyección. En este trabajo se prepararon ferrofluidos acuosos con buena estabilidad usando nanopartículas magnéticas: sin y con funcionalización covalente. Los mismos se utilizaron para realizar barridos de aceite en una celda de Hele-Shaw. La celda se construyó con dos placas de acrílico, sobre una de ellas se fresó numéricamente una distribución aleatoria de obstáculos cilíndricos de 1,4 mm de diámetro y una altura de 400 m, generando una fracción de ocupación del 12%. Para estudiar el mejoramiento de la recuperación de aceite se efectuaron barridos con los ferrofluidos a una misma concentración de nanopartículas (sin y con funcionalización) y a diferentes caudales de inyección. A partir de análisis de imágenes logramos calcular el volumen de aceite desplazado en cada barrido observando que el ferrofluido con partículas funcionalizadas consigue recuperar más aceite para todos los caudales estudiados.

Clasificación de cultivos en imágenes satelitales con técnicas de Deep Learning

• Luca Scalambrin,[1,2] Jorge Osmar Lugo,[1,2] Félix Ramón Rojo Lapalma[1,2]

[1] *Área de Análisis y Sistemas Complejos - INVAP S.E.*
[2] *Instituto Balseiro - Universidad Nacional de Cuyo*

La agricultura es uno de los principales motores de muchas de las economías del mundo, siendo uno de los pilares fundamentales en la economía de Argentina, cuyos productos lideran el mercado mundial de granos. Esto implica que el planeamiento estratégico para la utilización de los recursos disponibles deberá permitir maximizar la producción total, lo cual será posible a partir de diferentes herramientas tecnológicas que se encuentren disponibles. Aquí es donde la clasificación de cultivos toma un rol central, dado que conocer el tipo de cultivo que se encuentra en desarrollo en las diferentes regiones del país permitirá llevar a cabo estimaciones sobre el rendimiento que tendrán las diferentes plantaciones, lo cual posibilitará optimizar la toma de decisiones, facilitando mejoras en el planeamiento y la gestión que, a su vez, permitirán adoptar prácticas que garanticen la preservación del suelo para el futuro y de esta forma poder preservar el medio ambiente. Las imágenes satelitales junto con la inteligencia artificial, más específicamente el área de Machine Learning, son dos tecnologías desarrolladas por el hombre que han demostrado tener un gran desempeño a la hora de realizar clasificaciones de cultivos. En este trabajo se llevó a cabo un workflow en el cual se realizó una segmentación sobre la región de interés, para luego clasificar los cultivos allí presentes. Para esto se emplearon dos arquitecturas de redes neuronales profundas diferentes, una para clasificar y otra para segmentar. Para el proceso de clasificación se empleó el dataset de la región de Gral. López, Santa Fe, utilizado en la competencia "Clasificación de cultivos utilizando imágenes satelitales" propuesta por la Fundación Sadosky junto con la Bolsa de comercio de Rosario y la Bolsa de Cereales de Buenos Aires en diciembre del 2020. Al emplear una previa segmentación de la región se pudo generar una aumentación de datos que permitió incrementar la precisión de la clasificación obtenida por la ganadora de la competencia. Más aún, el flujo aquí propuesto permitió obtener una precisión balanceada de 57%, siendo de 54% la mayor precisión alcanzada durante la competencia.