

Espectroscopía Atómica y Nuclear

> Medición de probabilidades de transición radiativa mediante impacto de electrones

Medición de probabilidades de transición radiativa de emisiones K mediante impacto de electrones. En una primera aproximación, esta cantidad no depende de la energía de la partícula ionizante, en lo que se conoce como aproximación de átomo congelado. Sin embargo, en estudios preliminares se ha observado cierta dependencia que podría contradecir la hipótesis mencionada. Se prevé realizar mediciones en el SEM, en blancos de Cu, Co o Ni para corroborar la influencia de la energía del haz de electrones mencionada —G. Castellano, R. Bonetto, J. Trincavelli, M. Vasconcellos y C. Campos, Optimization of K-shell intensity ratios in electron probe microanalysis; X-Ray Spectrom. 31 (2002) 184.

>>> **Docente:** Jorge Trincavelli - **Correo:** trincavellijorge@gmail.com

> Determinación de secciones eficaces de ionización M de elementos pesados por impacto de electrones

Determinación de secciones eficaces de ionización M (M1, M2, M3, M4 y M5) de algunos elementos pesados (por ejemplo Hf, Ta, W o Pb) por impacto de electrones. Las secciones eficaces de ionización M son más difíciles de determinar que las L, y por lo tanto más escasas y necesarias en la literatura —Alejo Carreras, Gustavo Castellano, Silvina Segui, Jorge Trincavelli, Experimental x-ray production cross sections for the M3, M4 and M5 subshells of Pt and Au by electron impact, Phys. Rev. A, 102 (2020) 012817—. Los resultados obtenidos serán comparados con los predichos por modelos teóricos y con datos experimentales disponibles.

>>> **Docente:** Alejo Carreras – **Correo:** alejocarreras@unc.edu.ar

> Determinación de la sección eficaz de ionización K elementos livianos

Las secciones eficaces de ionización son parámetros de gran interés en física atómica, tanto desde el punto de vista básico como aplicado. Estas secciones son proporcionales a la probabilidad de ionizar una determinada capa atómica (K, L, M, etc.) de un determinado elemento. Si bien las secciones eficaces de ionización K presentan menos inconvenientes en su determinación tanto experimental como teórica (ya que se trata de una única capa atómica), existen algunas dificultades experimentales para elementos de muy bajo número atómico, lo cual lleva a que existan discrepancias. Por este motivo, la determinación experimental de la curva de sección eficaz de elementos livianos constituye un aporte de interés en el área.

>>> **Docentes:** Silvina Limandri - Jorge Trincavelli - **Correo:** slimandri@unc.edu.ar

Más información: <https://journals.aps.org/prab/abstract/10.1103/PhysRevA.86.042701#fulltext>

> Determinación de secciones eficaces de ionización M de algunos metales raros, por ejemplo Eu, Dy o Yb, por impacto de electrones

Los metales raros, también denominados lantánidos o tierras raras, han encontrado numerosas aplicaciones en desarrollos tecnológicos recientes. Las secciones eficaces son representativas de las probabilidades de que ocurra cierta interacción (en este caso, ionizaciones). Para obtener estos parámetros, los espectros de emisión se medirán en nuestro SEM, y requieren de un procesamiento especial que será abordado mediante el software POEMA desarrollado en el grupo [S. Limandri, J. Trincavelli, R. Bonetto y A. Carreras, Structure of the Pb, Bi, Th and U M X-ray spectra, Phys. Rev. A 78 (2008) 022518]. Los resultados obtenidos serán comparados con los predichos por modelos teóricos y con datos experimentales cuando se disponga de ellos [A. Carreras, G. Castellano, S. Segui, J. Trincavelli, Experimental x-ray production cross sections for the M3, M4 and M5 subshells of Pt and Au by electron impact, Phys. Rev. A, 102 (2020) 012817].

>>> **Docente:** Gustavo Castellano – **Correo:** gustavo.castellano@unc.edu.ar

Más información: <https://www.famaf.unc.edu.ar/~gcas/>

> Microanálisis de contenido de metales y no metales en tejidos tumorales por micro-Fluorescencia de Rayos X (micro-XRF)

Recientemente el contenido de fósforo ha comenzado a emplearse para monitorear la actividad metabólica de células tumorales puesto que este elemento juega un rol importante en el crecimiento del cáncer. Numerosos investigadores han reportado que la cantidad de fósforo en sangre de pacientes con cáncer se incrementa y que además las células tumorales consumen compuestos fosforados aproximadamente seis veces más de lo normal. Por contrapartida, la reducción de los niveles de fósforo en sangre produce una considerable reducción del tamaño del tumor. En esta propuesta el nivel de fósforo en tejidos tumorales será empleado para determinar la presencia de células tumorales activas y se estudiará su posible vinculación con la mitosis celular. En las zonas activas del tumor se estudiará además el comportamiento de otros elementos como Ca, Fe, Cu y Zn, los cuales tienen una participación determinante en la evolución de la enfermedad.

>>> **Docente:** Roberto Daniel Perez – **Correo:** r.daniel.perez@unc.edu.ar

Más información: http://tiny.cc/TemasInv_LTFNC

> Microanálisis de metales por técnicas de rayos x en plantas acuáticas empleadas en biorremediación

En los procedimientos analíticos para determinar el grado de eficiencia de las plantas en la captación de contaminantes metálicos por rizofiltración, se debe medir la concentración de metales en el medio acuoso y en las plantas. La cuantificación de metales permite identificar las plantas que ya no absorben contaminantes metálicos para proceder a su reemplazo. En esta propuesta se desarrollará la espectrometría por micro-XRF para la determinación de metales in vivo en plantas acuáticas. Por otro lado, también es de suma importancia conocer el estado químico del cobre incorporado en las plantas para decidir el destino final de las plantas reemplazadas. Un estudio de este tipo puede llevarse a cabo analizando la dispersión inelástica Raman de los átomos metálicos en las plantas. Esta radiación dispersada se induce con excitación monocromática próxima, pero por debajo de las energías de ligadura del metal estudiado.

>>> **Docente:** Roberto Daniel Perez – **Correo:** r.daniel.perez@unc.edu.ar

Más información: http://tiny.cc/TemasInv_LTFNC

> Estudio de la capacidad remediadora de microorganismos extremófilos de la Patagonia Norte para el tratamiento de agua contaminada por arsénico

En la Cordillera de los Andes, al oeste de la Patagonia Norte, hay más de 60 volcanes activos o potencialmente activos y los dos grandes ríos (Neuquén y Limay) de la Patagonia Norte nacen en volcanes que introducen numerosos metales pesados y arsénico a los sistemas acuáticos y a la biota. La Biorremediación es amigable con el medio ambiente, siendo las algas y microalgas (o cianobacterias) las más efectivas para su implementación. Además, las cianobacterias extremófilas son particularmente interesantes porque reúnen características distintivas debido a que los ambientes hostiles estimulan a los microorganismos a producir mecanismos más eficientes de bioadsorción para asegurar su supervivencia. En esta propuesta el objetivo es desarrollar la TXRF para medir trazas de As en agua y estudiar la posibilidad de realizar estudios de especiación química de As en muestras de algas.

>>> **Docente:** Roberto Daniel Perez – **Correo:** r.daniel.perez@unc.edu.ar
Más información: http://tiny.cc/TemasInv_LTFNC

> Diseño, confección y caracterización de un monocapilar elíptico para focalizar rayos x

Los capilares usualmente son fabricados de vidrio de alta pureza. El principio físico que rige su funcionamiento como elemento óptico útil para rayos x, es la reflexión total externa de los fotones que ocurre en las paredes interiores del capilar. Debido a las múltiples reflexiones que experimentan los fotones en las paredes internas del capilar, se requieren cálculos asistidos por computadora para determinar el perfil del haz de salida. Conocer este perfil es fundamental para definir completamente las propiedades físicas de una lente de rayos x y elegir, previo a la fabricación, la geometría del capilar más adecuado para el tipo de experimento deseado. En esta propuesta se pretende proyectar un capilar elíptico mediante simulaciones de trazado de rayos y construirlo mediante deformación por calor de tubos de vidrio borosilicato puro. El perfil del haz será determinado experimentalmente estudiando la transmisión de rayos x en una lámina delgada de cobre (2 micrones) a la salida del capilar.

>>> **Docente:** Roberto Daniel Perez – **Correo:** r.daniel.perez@unc.edu.ar
Más información: http://tiny.cc/TemasInv_LTFNC

> Cálculos teóricos de secciones eficaces de ionización de capas atómicas internas

Las secciones eficaces de ionización σ son parámetros de gran interés en física atómica, tanto desde el punto de vista básico como aplicado. El parámetro σ es proporcional a la probabilidad de ionizar una determinada capa atómica (K, L, M, etc.) de un determinado elemento; además es diferente según sea el tipo de partícula incidente que causa la ionización. Así se tiene, por ejemplo, la sección eficaz de ionización de la capa K del azufre por impacto de protones o la sección eficaz de ionización de la capa L3 de la plata por impacto de electrones. En cada caso, se trata de una función de la energía E de la partícula incidente. La determinación experimental de estas funciones σ permite validar —o refutar— modelos teóricos en el marco de la física atómica y además provee información indispensable para la descripción del espectro de emisión de rayos x, necesaria para la caracterización de materiales de manera no destructiva. Los cálculos se realizarán para complementar determinaciones experimentales realizadas en nuestro laboratorio, mediante el formalismo de ondas distorsionadas —J. M. Fernández-Varea, S. Segui y M. Dingfelder, $L\alpha$, $L\beta$, and $L\gamma$ x-ray production cross sections of Hf, Ta, W, Re, Os, Au,

Pb, and Bi by electron impact: Comparison of distorted-wave calculations with experiment; Phys. Rev. A 83 (2011) 022702—.

>>> **Docente:** Silvina Segui – **Correo:** silvinasegui@gmail.com

> Algoritmo Genético para búsqueda de nanocluster de sistemas atómicos

Los clusters, como agregados de unos pocos a miles de átomos o moléculas, unen el mundo microscópico de átomos y moléculas con el mundo macroscópico de los materiales. Las simulaciones por Algoritmo Genético (GA) permiten generar un conjunto de configuraciones representativas de estos sistemas de los cuales se puede extraer propiedades estructurales y termodinámicas. Las propiedades físicas y químicas de un clúster están determinadas por la estructura de su estado fundamental, las cuales son significativamente diferentes a las de los sistemas masivos y dependen sensiblemente del tamaño del grupo, por su relación superficie-volumen. Determinar la estructura del estado fundamental de un cúmulo es una tarea desafiante debido a la extrema complejidad de la Energía Potencial Superficial (PES) de alta dimensión. La minimización energética es un método costoso para explorar un gran número de estructuras de nanocluster. La dinámica molecular (MD) permite relajar el sistema en función del tiempo y la temperatura, al simular la dinámica del mismo mediante la integración de las ecuaciones de movimiento de Newton para cada átomo. Considerando que la MD relaciona los efectos mecánico cuánticos de los electrones, incluidos en el cálculo de la energía y las fuerzas, con el movimiento clásico de los núcleos. El GA es un método de optimización global eficiente para explorar el PES de los clústers, con cálculos mecánico cuánticos por el método ab initio. La propuesta es desarrollar un programa de GA en Python y sus librerías, para determinar las estructuras de energía más baja de una variedad de grupos elementales y compuestos (C, BN, Au, Ag), e investigar sus propiedades físicas las cuales serán comparadas con datos experimentales de nanomateriales. Esta propuesta de Trabajo Final para la Licenciatura en Física, conlleva una continuación en una Tesis Doctoral que incluya machine learning en física y posibilidad de realizar un posdoctorado en la Universidad Humboldt de Berlín Alemania.

>>> **Docente:** Gabriela Grad – **Correo:** gabriela.grad@unc.edu.ar
Más información: <https://www.famaf.unc.edu.ar/~bonzie/>

> Microtomografía de rayos X: Adquisición y procesamiento matemático dedicado

Las actividades de este trabajo final están orientadas a la integración del proceso de X-ray Imaging contemplando desde la formación y adquisición de la imagen 2D y 3D, hasta el análisis e interpretación de la misma. La integración de estos conocimientos con algoritmos matemáticos y técnicas computacionales específicas, permiten desarrollar e implementar en el laboratorio un sistema integral capaz de optimizar la técnica de X-ray Imaging. Dentro de las técnicas de adquisición de imágenes se utilizan las técnicas convencionales por contraste de absorción (radiografía). En esta propuesta se pretende estudiar y aplicar diferentes algoritmos matemáticos de filtrado, suavizado y reconstrucción 3D en función de las imágenes adquiridas en el laboratorio. Se trabajará también en el proceso de adquisición de la tomografía estudiando los principales parámetros físicos que intervienen en el contraste de las imágenes. Estos objetivos apuntan a mejorar la calidad de la información obtenida a partir de las imágenes adquiridas. Se trabajará en colaboración con arqueólogos, paleontólogos y biólogos en el estudio tridimensional mediante tomografía de RX de estructuras óseas principalmente, como así también con la Cátedra de Imágenes de la Facultad de Odontología de la Universidad Nacional de Buenos Aires.

>>> **Docente:** Germán Tirao – **Correo:** gtirao@unc.edu.ar

> Clustering de Cluster mediante Machine Learning

Los clústeres, como agregados de unos pocos a miles de átomos o moléculas, unen el mundo microscópico de átomos y moléculas con el mundo macroscópico de los materiales. Generando clúster y relajando su energía nos permite obtener conjuntos de configuraciones representativas de estos sistemas, de los cuales se puede extraer propiedades estructurales y termodinámicas. Las propiedades físicas y químicas de un clúster están determinadas por la estructura de su estado fundamental, las cuales son significativamente diferentes a las de los sistemas masivos y dependen sensiblemente del tamaño del grupo, por su relación superficie-volumen. Determinar la estructura del estado fundamental de un cúmulo es una tarea desafiante debido a la extrema complejidad de la Energía Potencial Superficial (PES) de alta dimensión. La minimización energética es un método costoso para explorar un gran número de estructuras de nanocluster. La dinámica molecular (MD) permite relajar el sistema en función del tiempo y la temperatura, al simular la dinámica del mismo mediante la integración de las ecuaciones de movimiento de Newton para cada átomo. Considerando que la MD relaciona los efectos mecánico cuánticos de los electrones, incluidos en el cálculo de la energía y las fuerzas, con el movimiento clásico de los núcleos. El Clustering o análisis de conglomerados es una técnica de aprendizaje automático, que agrupa en diferentes grupos al conjunto de objetos en estudio, según tengan características similares, vía un método de análisis del Machine Learning (ML) de aprendizaje no supervisado. Ello nos permitirá explorar la característica de los clústeres que origine una menor PES. La propuesta es desarrollar un programa de ML en Python y sus librerías, para determinar las características de las estructuras de clúster con energía más baja, de una variedad de grupos elementales y compuestos (C, BN, Au, Ag), e investigar sus propiedades físicas. Esta propuesta de Trabajo Final para la Licenciatura en Física, conlleva una continuación en una Tesis Doctoral que incluya machine learning en física y posibilidad de realizar un posdoctorado en la Universidad Humboldt de Berlín Alemania.

>>> **Docentes:** Gabriela Grad y Edgardo Bonzi – **Correo:** edgardo.bonzi@unc.edu.ar
Más información: <https://edgardobonzi.github.io/TrabajosFinales/>

> Instrumentación para estudios de dispersión de rayos X a bajo ángulo

Las diversas técnicas de rayos X permiten caracterizar los materiales en diversas escalas que van desde los nm hasta los mm. Particularmente, la dispersión de rayos X a bajo ángulo (SAXS) permite un estudio a escala nanométrica para determinar distribuciones de formas y tamaños y es muy usada en sistemas biológicos, polímeros, entre otros. Muchas de las mediciones de SAXS se hacen en grandes facilidades (sincrotrón) y otras se realizan en equipos de laboratorio. En el país existen 2 equipos para medir SAXS y la alta demanda hace que su acceso sea limitado. Aquí en FAMAF, estamos construyendo un equipo de SAXS que sea de fácil acceso a toda la comunidad. Esta propuesta de trabajo especial involucra el diseño y construcción de un sistema óptico para la puesta en funcionamiento del instrumento de SAXS mencionado, como así también la caracterización completa del equipamiento.

>>> **Docentes:** Tiraó Germán - Víctor Galván – Correo: gtirao@unc.edu.ar

