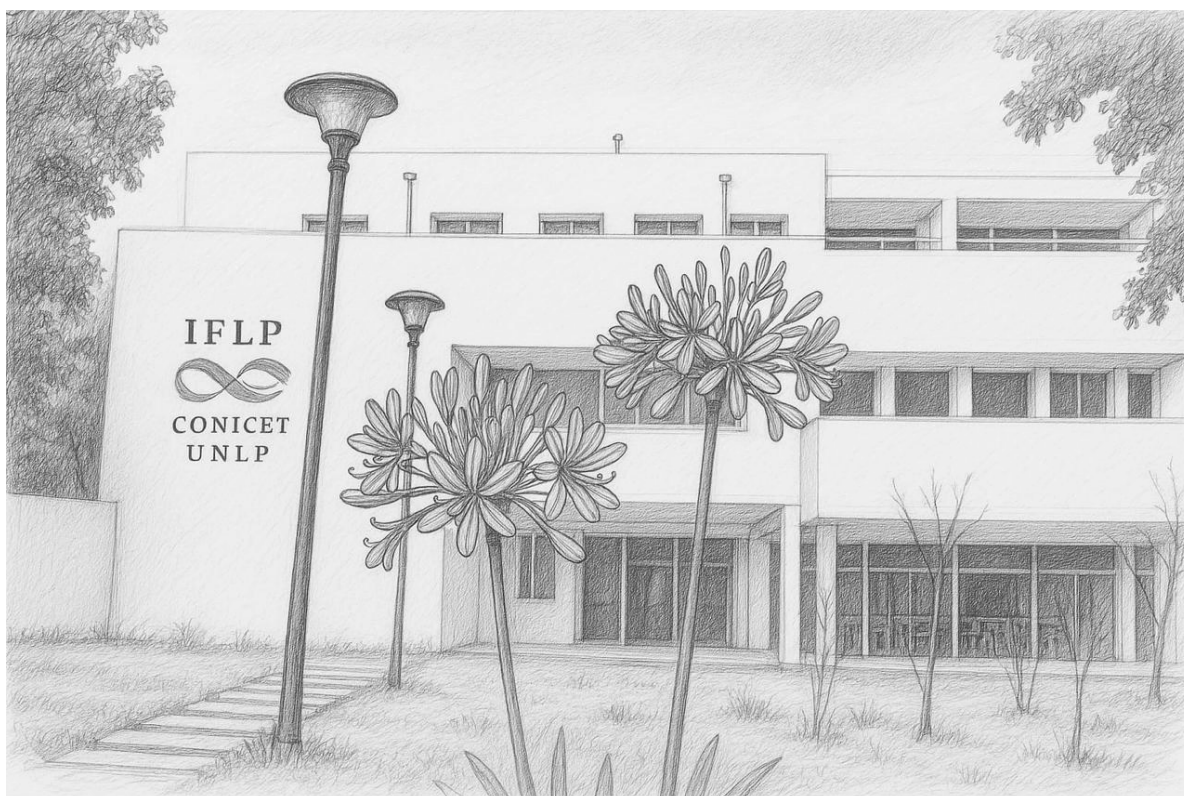


CIF

Congreso de Investigaciones Formativas



Libro de resúmenes del Congreso de Investigaciones Formativas IFLP : Instituto de Física La Plata UNLP CONICET / Martin Parlanti ... [et al.] ; Coordinación general de Maria Teresa Dova ; Editado por Verónica Liz Díaz De Rosa ; Mauro Granado;

Fotografías de Verónica Liz Díaz De Rosa. - 15a ed. - La Plata : Universidad Nacional de La Plata. Facultad de Ciencias Exactas, 2025.

Libro digital, PDF - (Libro de resúmenes del Congreso de Investigaciones Formativas ; 2)

Archivo Digital: descarga y online

ISBN 978-950-34-2602-9

1. Física. I. Parlanti, Martin II. Dova, Maria Teresa, coord. III. Diaz De Rosa, Verónica Liz, ed. IV. Granado, Mauro, ed. V. Díaz De Rosa, Verónica Liz, fot. CDD 190

ISBN 978-950-34-2602-9



PRÓLOGO

La ciencia es una aventura colectiva que avanza gracias al trabajo de generaciones de investigadoras e investigadores que, con rigor y perseverancia, han expandido los límites del conocimiento humano. En este camino, las y los jóvenes ocupan un lugar fundamental, son el gran motor que impulsa descubrimientos, desarrollos tecnológicos y nuevas miradas sobre las grandes preguntas de la ciencia. Para poder avanzar, desde las primeras etapas de la carrera se requiere pasión, dedicación y una dosis de capacidad de asombro que, afortunadamente, nunca se agota!

En el Instituto de Física La Plata (IFLP) se realizan investigaciones en física básica y aplicada, en temáticas que van desde la estructura fundamental de la materia, la física matemática y la información cuántica, hasta el estudio de nuevos materiales y compuestos de interés biológico, y también se desarrollan nuevos instrumentos y tecnologías con aplicaciones en salud, medioambiente y el sector socio-productivo.

En este libro se reúnen experiencias, logros y desafíos de las becarias y los becarios del IFLP presentadas en el Congreso de Investigaciones Formativas (CIF) 2025. Lo que estas páginas muestran es la esencia de la investigación: la pasión por comprender, la paciencia para intentar una y otra vez y la valentía de cuestionar lo que se da por sentado. A través de una serie de resúmenes de sus trabajos se refleja no solo la diversidad de temas abordados sino también la riqueza de enfoques y metodologías, así como la frescura y el rigor con que han sido tratados. En nuestro instituto, la juventud no es sinónimo de inexperiencia, sino de una mirada nueva que se atreve a cuestionar, combinar ideas y proponer caminos alternativos. Vemos a estudiantes de doctorado que, entre cálculos, incontables líneas de código, instrumentos sofisticados, largas horas en el laboratorio, discusiones interminables, mates y cafés a deshora, persiguen un objetivo común: la búsqueda del conocimiento.

Uno de los pilares del IFLP es la formación de las y los científicos del futuro. Estamos convencidos de que esta formación no se limita solamente a la adquisición de conocimientos y al desarrollo de competencias, sino que incluye también la incorporación de valores como la honestidad intelectual, la colaboración interdisciplinaria y el compromiso con el bien común. En este sentido, este compendio de resúmenes es testimonio de una doble vocación: la excelencia en la investigación y la responsabilidad social que conlleva toda producción de conocimiento.

¡Que este libro sirva de inspiración para seguir explorando, cuestionando y construyendo juntos los nuevos capítulos de la física!

COMITÉ ORGANIZADOR:

- **Prof. Dra. Verónica Liz Díaz De Rosa** - v.diazderosa@iflp.unlp.edu.ar
Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina.
- **Lic. Giuliano Andrés Basso**
Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina.

COLABORADORES:

- **Lic. Mauro Granado**
Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina.
- **Dra. Ángela Candreva**
Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina.
- **Dr. Pedro Martinez**
Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina.
- **Dra. Patricia Hansen**
Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina.
- **Dra. Claudia Rodriguez**
Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina.
- **Dr. Ignacio Bruvera**
Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina.
- **Dra. Luciana Montes**
Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina.

- **Dr. Arles Gil Rebaza**

Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina.

- **Dra. Laura Damonte**

Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina.

CRONOGRAMA JUEVES 29/5		
08:30 - 09:00	APERTURA DEL EVENTO	
09:00 - 09:15	Ignacio Fushimi	Termodinámica Cuántica de un Sistema No-Hermítico
09:15 - 09:30	Carolina Otonelo	Purificación de Ácidos Nucleicos con Nanopartículas Magnéticas: Avances y Aplicaciones
09:30 - 09:45	Harry Saltos	Diseño de celdas solares de perovskita usando métodos DFT
09:45 - 10:00	Juan Manuel Pujol	Conjunto de observables que dan lugar a probabilidades negativas
10:00 - 10:15	Tomás Buratovich	Diseño de nuevos triggers para la Identificación de electrones y fotones con FPGAs en el detector ATLAS para el High-Luminosity LHC
10:15 - 10:45	CAFÉ	
10:45 - 11:00	Carlos Gastón Brusasco	Estudio de las interacciones magnéticas en espinelas AB_2O_4 ($A = Zn, Cd$; $B = Fe, Cr$) mediante DFT+U y el modelo de Heisenberg
11:00 - 11:15	Fran Cassinese Parisi	Selección e Identificación de fotones y electrones utilizando aislamiento en el experimento ATLAS para el High-Luminosity LHC
11:15 - 11:30	Medina Josefina	Nanoactuadores magnéticos para aplicaciones biomédicas por efecto magneto-mecánico
11:30 - 11:45	Jean Yves Beaucamp	Búsqueda de resonancias escalares de baja masa decayendo a pares boosteados de leptones tau, y desarrollos en el Trigger de Taus del Experimento ATLAS
11:45 - 12:00	Facundo A. Pedemonte	Optimización Mecanobiológica de Estructuras 3D Porosas para Osteointegración Mediante Aprendizaje Estadístico, Deep Learning y Simulación Mecánica Computacional
12:00 - 13:00	RECORRIDO POR LABORATORIOS	
13:00 - 14:00	ALMUERZO	
14:00 - 14:15	Martín Lagares	Uso de simetrías para el cálculo de correladores en teorías conformes de campos
14:15 - 14:30	Santiago Christiansen	Formalismo línea de mundo y su aplicación a problemas con bordes
14:30 - 14:45	Carlo Salvattore Cruz Sanchez	Incertidumbres en la determinación de observables de radio de lluvias de rayos cósmicos asociadas con los modelos de simulación: CoREAS y ZHAireS
14:45 - 15:00	Santiago Tanco	Vértices desplazados de neutrinos estériles en el LHC
15:00 - 15:15	Tomás Suleiman	Solitones en trans-poliacetileno

Continúa en la siguiente página

CRONOGRAMA JUEVES 29/5 (cont.)		
15:15 - 16:00	CAFÉ	
16:00 - 16:15	Fernando Lomoc	Formalismo de estados historia para series temporales
16:15 - 16:30	Lucas Acito	Estrellas holográficas y transiciones de fase
16:30 - 16:45	Martin Parlanti	Dispersión de 4 dilatinos en teoría de supercuerdas y dispersión elástica de protón-protón
16:45 - 17:00	Yanet Alvarez	Relación de incerteza para sistemas con hamiltonianos PT-simétricos

CRONOGRAMA VIERNES 30/5		
09:15 - 09:30	APERTURA	
09:30 - 09:45	Lucas Manzo	Problemas con borde en teoría cuántica de campos
09:45 - 10:00	Julián Andrés Zúñiga	Adsorción de nitrobenzeno sobre $\text{TiO}_2(101)$ anantasa: protonización superficial y vacancias de O
10:00 - 10:15	Ulises Wainstein Hai-movichi	Una pizca de resurgencia y formalismo línea de mundo
10:15 - 11:00	CAFÉ	
11:00 - 11:15	Lucas Emilio Martín	Cálculo de la amplitud de dispersión de dilatón-dilatino a dilatón-dilatino en la teoría de supercuerdas del tipo IIB y aplicaciones a la dinámica de glueball-protón
11:15 - 11:30	Lucas Melia	Heteroestructuras de grafeno y ZnO para la remoción de colorantes orgánicos
11:30 - 11:45	Giuliano Andrés Basso	Nanopartículas magnéticas para aplicaciones biomédicas: determinación experimental del tiempo de relajación y potencia disipada ante la exposición a campos magnéticos de radiofrecuencia
11:45 - 12:00	Santos Lizeth Chucchucan González	Modelado DFT de materiales termoeléctricos
12:00 - 14:00	ALMUERZO	
14:00 - 14:15	Natalí Guisande	Restauración funcional cortical y plasticidad de los campos receptivos visuales
14:15 - 14:30	Federico Petrovich	Factorización generalizada de estados cuánticos y matriz de covarianza
14:30 - 14:45	Nadia Capdet	Potenciación del efecto antitumoral mediante hipertermia magnética y un complejo de cobre-hidrazona en cáncer de colon
14:45 - 15:00	Agustin Cianciulli	Determinación del Hamiltoniano a partir de las matrices densidad de M-cuerpos, utilizando técnicas de Machine Learning
15:00 - 15:15	Jonatan Chaves	Comparación de funciones de estructura del protón a partir de Pomerones holográficos duales con resultados de funciones de distribución partónicas
15:15 - 15:45	CAFÉ	
15:45 - 16:00	Montserrat Pallares Di Nunzio	Comparación de pipelines para la detección del estado preictal a partir de señales EEG
16:00 - 16:15	Gaspar Gonzalez	Cuantificadores de información aplicados a la evolución del COVID-19

Continúa en la siguiente página

CRONOGRAMA VIERNES 30/5 (cont.)		
16:15 - 16:30	Mauro Granado	Biomarcadores topológicos en epilepsia canina mediante patrones ordinales y mapas autoorganizados
16:30 - 16:45	Verónica L. Díaz De Rosa	Desarrollo y caracterización de minerales arcillosos tipo Montmorillonita con aplicación ambiental en remediación de contaminantes
17:00 - 17:15	CLAUSURA DEL EVENTO	

Lista de Oradores - Jueves 29/5

Bloque 1:

- Ignacio Fushimi
- Carolina Otonelo
- Harry Saltos
- Juan Manuel Pujol
- Tomás Buratovich

Bloque 2:

- Carlos Gastón Brusasco
- Fran Cassinese Parisi
- Josefina Medina
- Jean Yves Beaucamp
- Facundo A. Pedemonte

Bloque 3:

- Martín Lagares
- Santiago Christiansen
- Carlo Salvattore Cruz Sanchez
- Santiago Tanco
- Tomás Suleiman

Bloque 4:

- Fernando Lomoc
- Lucas Acito
- Martin Parlanti
- Yanet Alvarez

Lista de Oradores - Viernes 30/5

Bloque 5:

- Lucas Manzo
- Julián Andrés Zúñiga
- Ulises Wainstein Haimovichi

Bloque 6:

- Lucas Emilio Martín
- Lucas Melia
- Giuliano Andrés Basso
- Santos Lizeth Chucchucan González

Bloque 7:

- Natalí Guisande
- Federico Petrovich
- Nadia Capdet
- Agustín Cianciulli
- Jonatan Chaves

Bloque 8:

- Monserrat Pallares Di Nunzio
- Gaspar Gonzalez
- Mauro Granado
- Verónica L. Díaz De Rosa

PRESENTACIONES ORALES

Termodinámica Cuántica de un Sistema No-Hermitico

I. FUSHIMI¹, M. REBOIRO¹, D. TELIAS¹

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

email: ifushimi@iflp.unlp.edu.ar, reboiro@iflp.unlp.edu.ar

La cuántica no hermítica se desarrolló para entender los procesos del núcleo atómico [1]. Hoy en día, estas herramientas se aplican en una amplia variedad de áreas. En nuestro caso, modelamos un sistema híbrido compuesto por un ensamble de vacancias de nitrógeno en diamante (NV) y un qubit de flujo superconductor (SFQ) [2]. Introducimos una interacción que da lugar a un hamiltoniano pseudo-hermítico, un caso particular de los hamiltonianos no hermíticos con propiedades interesantes.

En nuestro trabajo, utilizamos este modelo para entender la evolución temporal a $T=0$ y la termodinámica del sistema en un momento dado. En particular, encontramos puntos excepcionales en el espacio de fase, donde el hamiltoniano no se puede diagonalizar. En estos, encontramos efectos interesantes como decaimientos no exponenciales [2]. Mas ahun, las cantidades termodinámicas se comportan de tal forma que permite establecer un ciclo de Carnot en zonas estables del espacio de fase, y por ende, comparar esa eficiencia con aquella de otros ciclos, con la posibilidad de encontrar un ciclo con mejor eficiencia que la de Carnot [3, 4].

El próximo paso en nuestra investigación es estudiar la evolución temporal a temperatura finita.

Referencias

- [1] Feshbach, H. (1958). Unified theory of nuclear reactions. *Annals Phys.*, 5, 357–390.
- [2] Ramírez, R., Reboiro, M. & Tielas, D. Exceptional Points from the Hamiltonian of a hybrid physical system: Squeezing and anti-Squeezing. *Eur. Phys. J. D* 74, 193 (2020).
- [3] I. Fushimi, M. Reboiro. En escritura.
- [4] Fring, A., Reboiro, M. Phase transitions and thermodynamic cycles in the broken PT-regime. *Eur. Phys. J. Plus* 139, 733 (2024)

Purificación de Ácidos Nucleicos con Nanopartículas Magnéticas: Avances y Aplicaciones

C. OTONELO¹², C. LAYANA², P. MENDOZA ZÉLIS¹ S. ONS² L. JUNCAL¹ K. SALCEDO RODRÍGUEZ¹, C. RODRÍGUEZ TORRES¹

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Facultad de Ciencias Exactas (FCE), Universidad Nacional de La Plata (UNLP), Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

² *Laboratorio de Genética y Genómica Funcional, Centro Regional de Estudios Genómicos (CREG - CENEXA), Facultad de Ciencias Exactas (FCE), UNLP, CONICET, La Plata, Argentina*

email: carolinaotonelo@iflp.unlp.edu.ar

La extracción y purificación de ácidos nucleicos representa una etapa fundamental en múltiples aplicaciones biotecnológicas, tales como el diagnóstico de enfermedades infecciosas y el estudio de la expresión génica. Actualmente, estos procesos se realizan mayoritariamente mediante columnas comerciales con fases sólidas basadas en sílice, lo que implica altos costos en equipos e insumos. Una alternativa, que permite abaratar costos y automatizar el proceso, es el desarrollo de métodos de purificación basados en nanopartículas magnéticas (NPM) sintetizadas y funcionalizadas en el laboratorio [1, 2]. En trabajos previos, el método ya ha sido validado para purificación en hisopados nasales para la detección de SARS-CoV-2 [3]

En esta charla se presentarán resultados en relación con el uso de NPM recubiertas con sílice para la purificación de ADN y ARN a partir de cultivos celulares y de insectos (*Drosophila*). Mostraremos los resultados obtenidos en el Laboratorio Nacional de Luz Sincrotrón (LNLS, Brasil), donde se utilizaron espectroscopía infrarroja (FTIR) y dicroísmo circular (CD) para estudiar la interacción molecular entre los ácidos nucleicos y las NPM. Encontramos que los ácidos nucleicos interactúan molecularmente con las NPM y que, según la composición del buffer de lisis, se favorece la recuperación diferencial de ADN o ARN, lo que sugiere un mecanismo de adsorción sensible a las condiciones fisicoquímicas del entorno. Esto implica, que las condiciones del ensayo, particularmente la composición del buffer de lisis, influyen fuertemente en la afinidad de las partículas por los diferentes ácidos nucleicos, lo cual puede aprovecharse para diseñar protocolos de purificación específicos.

Además, se presentarán resultados preliminares en el uso del método para purificación de ácidos nucleicos utilizados para el testeo de infecciones ginecológicas causadas por el Virus del Papiloma Humano (HPV), *Chlamydia trachomatis*, *Mycoplasma hominis*, y *Ureaplasma urealyticum*.

Referencias

- [1] Lee, A. H., Gessert, S. F., Chen, Y., Sergeev, N. V., & Haghiri, B. (2018). Preparation of iron oxide silica particles for Zika viral RNA extraction. *Helvion*, 4(3). <https://doi.org/10.1016/j.helivon.2018.e00572>

- [2] Zhao, Z., Cui, H., Song, W., Ru, X., Zhou, W., & Yu, X. (2020). A simple magnetic nanoparticles-based viral RNA extraction method for efficient detection of SARS-CoV-2. *BioRxiv*. <http://doi.org/10.1101/2020.02.22.961268>
- [3] Capriotti, N., et al. (2024). Silica-coated magnetic particles for efficient RNA extraction for SARS-CoV-2 detection. *Heliyon*, 10(3). <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e25377>

Diseño de celdas solares de perovskita usando métodos DFT

H. B. SALTOS SÁNCHEZ^{1,2}, M. A. CAPPELLETTI^{1,4}, A. V. GIL REBAZA³

¹ *Grupo de Control Aplicado (GCA), Instituto LEICI (CONICET-UNLP), 1900 La Plata – Argentina.*

² *Becario de la Comisión de Investigaciones Científicas, Provincia de Buenos Aires (CICPBA)*

³ *Instituto de Física La Plata (IFLP), CCT La Plata – CONICET, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad Nacional de La Plata (UNLP), 1900 La Plata – Argentina.*

⁴ *Programa TICAPPS, Universidad Nacional Arturo Jauretche, Av. Calchaquí 6200, 1888 Florencio Varela, Buenos Aires – Argentina.*

email: harry.saltos@ext.ing.unlp.edu.ar

La energía solar representa una alternativa sostenible y de bajo impacto ambiental frente a las fuentes fósiles tradicionales. En este contexto, las celdas solares de perovskita (CSP) han emergido como una tecnología prometedora por su alta eficiencia, bajo costo de fabricación y propiedades optoelectrónicas superiores. En particular, las CSP totalmente inorgánicas ofrecen ventajas en estabilidad y seguridad ambiental.

En nuestro grupo de trabajo estudiamos computacionalmente a las perovskitas inorgánicas del tipo CsBX_3 ($\text{B}=\text{Pb}$, Ge ; $\text{X}=\text{Br}$, Cl , I) con el objetivo de identificar materiales candidatos para celdas solares con menor impacto ambiental libre de plomo.

Mediante cálculos de primeros principios basados en Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), se analizaron propiedades clave como energía de formación, estructura electrónica y absorción óptica.

Estas simulaciones se complementaron con cálculos numéricos de eficiencia de celdas solares utilizando el software SCAPS-1D, con el fin de identificar la configuración óptima para lograr la máxima eficiencia de conversión de potencia, evaluando ZnO como capa de transporte de electrones y Cu_2O como capa de transporte de huecos.

Referencias

- [1] Kojima, A. (2009). Organometal halide perovskites as visible-light sensitizers for photovoltaic cells. *J. Am. Chem. Soc.*, 131(17), 6050–6051.
- [2] Suryani, N. (2023). Promises and challenges of perovskite solar cells: A comprehensive review. *Bull. Appl. Sci. Eng.*, 1(4), 145–159.
- [3] Zhou, Y. (2023). Developments on high-efficient perovskite solar cells. *Acc. Mater. Res.*, 4(5), 378–392.
- [4] NREL. (2024). Best Research-Cell Efficiency Chart. <https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html>
- [5] Khenkin, M. (2017). From lab to market: Challenges in perovskite solar cell commercialization. *Joule*, 1(4), 557–580.

Observables que dan lugar a probabilidades negativas

J. M. PUJOL¹, M. PORTESI¹, F. HOLIK¹

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

email: pujol@iflp.unlp.edu.ar

La emergencia de probabilidades negativas en la descripción de un sistema cuántico puede ser usada como signatura de no-clasicalidad, y está relacionada con la noción de contextualidad cuántica [1], [2]. El estudio de la negatividad es de interés en distintas áreas, tales como la óptica cuántica y la computación cuántica. En esta contribución presentamos un estudio de situaciones que no pueden ser descritas mediante una distribución de probabilidad clásica, haciendo necesario el uso de probabilidades negativas. Esto pone en evidencia el carácter netamente cuántico de las correlaciones involucradas. En particular, estudiamos observables basados en bases mutuamente no sesgadas (MUBs), SIC-POVMs, y también otros operadores asociados con la contextualidad de Kochen–Specker.

Referencias

- [1] J. Acacio de Barros, F. Holik (2020). Indistinguishability and negative probabilities. *Entropy* 22, 829.
- [2] E. Monchetti, C. Massri, J. Acacio de Barros, F. Holik (2023). Measure-theoretic approach to negative probabilities. *arXiv:2302.00118*.

Diseño de nuevos triggers para la Identificación de electrones y fotones con FPGAs en el detector ATLAS para el High-Luminosity LHC

T. BURATOVICH¹, H. WAHLBERG¹, F. ALONSO²

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

email: tburatovich@iflp.unlp.edu.ar

Se espera que el LHC de Alta Luminosidad (HL-LHC) comience a operar con colisiones en 2030, alcanzando una luminosidad instantánea sin precedentes de $7 \times 10^{-34} \text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$ y con hasta 200 interacciones simultáneas por cruce de paquetes de protones. En este escenario es fundamental mejorar el detector ATLAS para asegurar que esté preparado para la recolección de datos. En particular, durante la Fase II de su actualización, el sistema de trigger y adquisición de datos deberá adaptarse a las exigentes condiciones del HL-LHC y responder a los desafíos del amplio programa de física de ATLAS para la próxima década. [1]

Dentro de estas mejoras, se está desarrollando el denominado Global Trigger, que, a diferencia de otras actualizaciones basadas principalmente en hardware, se implementa mayormente en firmware mediante placas FPGAs.

El algoritmo básico del Global Trigger para la identificación de electrones y fotones utilizará como variable discriminante la diferencia entre el primer y el segundo máximo locale de energía, normalizada por su suma. Esta cantidad se calcula típicamente en una ventana de 40×3 celdas del calorímetro, y permite una eficaz separación entre objetos electromagnéticos (como electrones y fotones) y fondos hadrónicos. Esto es especialmente relevante dado que el principal fondo para electrones y fotones en ATLAS proviene de jets de QCD, donde la partícula más energética es un pión neutro que decae en dos fotones muy cercanos.

Actualmente estoy explorando diferentes configuraciones del algoritmo y criterios de selección con el objetivo de optimizar sus parámetros. El objetivo final es desarrollar una simulación del algoritmo que pueda implementarse directamente en firmware.

En el final de la presentación discutiré brevemente próximos pasos basados en una propuesta de estudio de búsqueda de nueva física de baja masa en canales que contienen muones y leptones taus fuertemente colimados en base a datos que se están colectando actualmente en el detector.

Referencias

- [1] Evans, H. G., & ATLAS Collaboration. (2018). Technical design report for the Phase-II upgrade of the ATLAS TDAQ system.

Estudio de las interacciones magnéticas en espinelas AB_2O_4 ($A = \text{Zn, Cd}$; $B = \text{Fe, Cr}$) mediante DFT+U y el modelo de Heisenberg

C. G. BRUSASCO^{1,2}, L. A. ERRICO^{1,2,3}, A. V. GIL REBAZA^{1,2}

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

² *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, La Plata, Argentina*

³ *Universidad Nacional del Noroeste de la Provincia de Buenos Aires (UNNOBA), Pergamino, Argentina*

email: gaston.brusasco@fisica.unlp.edu.ar

Se estudiaron las espinelas AB_2O_4 , donde $A=\text{Zn,Cd}$ y $B=\text{Fe,Cr}$, con el objetivo de entender su comportamiento magnético. Para lograrlo, se realizaron cálculos de primeros principios mediante DFT (teoría de la funcional densidad), utilizando el método de pseudopotenciales y ondas planas. Se utilizó la aproximación GGA+U, con valores de U en el rango de 0 a 5 eV. Además, se evaluó comparativamente el rol de los cationes magnéticos y no magnéticos en cada sistema. Las energías obtenidas para distintas configuraciones magnéticas se mapearon a un modelo de Heisenberg de espines colineales, a partir del cual se extrajeron las constantes J_i que permitieron determinar la intensidad y el tipo de interacciones magnéticas (ferromagnéticas o antiferromagnéticas) entre espines vecinos.

Selección e Identificación de fotones y electrones utilizando aislamiento en el experimento ATLAS para el High-Luminosity LHC

F. CASSINESE PARISI¹, F. ALONSO¹, H. WAHLBERG²

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

email: fcassinese@iflp.unlp.edu.ar

En los próximos años se realizarán una serie de actualizaciones en el LHC para aumentar su luminosidad (tasa de eventos detectados) iniciando una nueva etapa conocida como High-Luminosity LHC (HL-LHC). Resulta necesario adaptar los sistemas de toma de datos de los detectores. ATLAS realizará actualizaciones del sistema TDAQ (Trigger and Data Acquisition) [1], entre las cuales se encuentra una instancia denominada Global Trigger, implementada íntegramente en placas FPGA (Field-Programmable Gate Array). El Global Trigger utiliza secuencialmente resultados del primer nivel de trigger, junto con datos de alta granularidad. Esto permite aplicar algoritmos normalmente utilizados en la reconstrucción offline[2] (es decir, posteriores a la toma de datos), dentro del procesamiento online del trigger, contando así con nuevas instancias de refinamiento de señal. Para el caso de fotones y electrones, esto se da en dos instancias consecutivas denominadas Egamma1 y Egamma2. Al analizar eventos con fotones y electrones como productos finales, es necesario discriminar aquellos donde las partículas se producen de forma directa en la colisión protón-protón, de las posibles fuentes de fondo (jets, pares de fotones colimados provenientes de decaimientos hadrónicos, pile-up). Cuando un fotón o un electrón es directo, se espera que haya poca actividad electromagnética en su vecindad, lo cual motiva la definición de una variable de aislamiento que calcule la energía dentro de un cono centrado en el candidato a fotón o electrón, descontando la energía propia del objeto. El presente trabajo busca adaptar los algoritmos de aislamiento ya implementados de manera offline para utilizarlos en la instancia Egamma2 del Global Trigger. Esto incluye la optimización de la forma y tamaño de los conos de aislamiento para lograr una buena separación entre señal y fondo, y una evaluación posterior del uso de recursos computacionales de los algoritmos en las FPGAs. Por último, se introducirá el tema de análisis que será otra tarea principal del trabajo a continuación en el doctorado. Este consiste en una búsqueda de resonancias de baja masa utilizando fotones altamente colimados, con el objetivo de explorar intervalos de baja energía en los cuales las técnicas de análisis habituales no son eficientes[3], utilizando herramientas de aprendizaje automático.

Referencias

- [1] ATLAS Collaboration, Technical Design Report for the Phase-II Upgrade of the ATLAS TDAQ System. (2017) ATLAS-TDR-029.

- [2] ATLAS Collaboration, Electron and photon performance measurements with the ATLAS detector using the 2015-2017 LHC proton-proton collision data. JINST 14 (2019) P12006.
- [3] ATLAS Collaboration, Search for resonances decaying into photon pairs in 139 fb⁻¹ of pp collisions at $\sqrt{s} = 13$ TeV with the ATLAS detector, Physics Letters B, Volume 822 (2021), 136651.

Nanoactuadores magnéticos para aplicaciones biomédicas por efecto magnetomecánico

J. MEDINA¹, G. PASQUEVICH¹, I. BRUVERA¹

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

² *Facultad de Ciencias Exactas UNLP*

email: josefina.medina_institucional@iflp.unlp.edu.ar

Las nanopartículas magnéticas y sus agregados han sido ampliamente explorados en biomedicina con el fin de poder utilizarse en aplicaciones como el diagnóstico por imágenes, terapias de hipertermia, administración dirigida de fármacos y acceso intracelular, entre otras funciones. En los últimos años ha surgido una alternativa terapéutica no térmica basada en efectos magnetomecánicos, en la cual el movimiento inducido por campos magnéticos genera daño mecánico intracelular, promoviendo la muerte de células tumorales [1][2].

Este trabajo de doctorado se centra en el estudio de nanoactuadores magnéticos (nAM)-nanopartículas, micropartículas o agregados funcionalizados- sometidos a campos magnéticos estáticos y rotantes de baja frecuencia (1–100 Hz). Dichos campos inducen oscilaciones y rotaciones que pueden desestabilizar estructuras subcelulares como membranas, endosomas o lisosomas, desencadenando apoptosis o necrosis, sin elevar la temperatura del medio [3][4]. La eficacia de este enfoque depende de factores como la composición, tamaño y geometría de los nAM, así como de las propiedades reológicas del entorno intracelular.

El proyecto combina estudios experimentales con herramientas de análisis de video por procesamiento digital de imágenes, técnicas de microscopía óptica invertida, diseño de sistemas de excitación magnética y modelado físico de los procesos involucrados. También se prevé el uso de medios modelo con propiedades viscoelásticas similares al citoplasma, como geles de agarosa y fantasmas poliméricos. El objetivo a largo plazo es establecer figuras de mérito físicas y fisiológicas que permitan evaluar la eficacia del tratamiento y optimizar la respuesta de los nAM.

En esta presentación se describen los objetivos y las estrategias metodológicas del plan, junto con los primeros resultados obtenidos durante las primeras semanas de trabajo experimental.

Referencias

- [1] Kim, D., Rozhkova, E. A., Ulasov, I. V., Bader, S. D., Rajh, T., Lesniak, M. S., et al.. (2010). Bio-functionalized magnetic-vortex microdiscs for targeted cancer-cell destruction. *Nature materials*, 9(2), 165-171. <https://doi.org/10.1093/natmat/gex002>.
- [2] Naud, Cécile, Caroline Thébault, Marie Carrière, Yanxia Hou, Robert Morel, François Berger, Bernard Diény, and Hélène Joisten. 2020. "Cancer Treatment by Magneto-Mechanical Ef-

fect of Particles, a Review.” *Nanoscale Advances* 2 (9): 3632–55. <https://doi.org/10.1039/d0na00187b>.

- [3] Wilhelm, C, F Gazeau, and J-C Bacri. Rotational magnetic endosome microrheology: viscoelastic architecture inside living cells.” *Physical Review E* 67.6 (2003): 061908.
- [4] Zhang, Enming et al.. ”Dynamic magnetic fields remote-control apoptosis via nanoparticle rotation.” *ACS nano* 8.4 (2014): 3192-3201.

Búsqueda de resonancias escalares de baja masa decayendo a pares *boosteados* de leptones tau, y desarrollos en el trigger de taus del Experimento ATLAS

J. Y. BEAUCAMP¹, H. P. WAHLBERG¹, M. T. DOVA¹

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

email: jean.yves.beaucamp@cern.ch

Existe una gran variedad de modelos de Nueva Física con la capacidad de explicar la fenomenología de la materia oscura (coy dark matter, axion-like particles, etc), que proponen la existencia de nuevos bosones escalares de baja masa por debajo de la escala electrodébil ($\lesssim 100$ GeV). Estas nuevas resonancias pueden ser incluidas en el Modelo Estándar por medio de sectores escalares expandidos, como en el modelo de dos dobletes de Higgs (2HDM), que no solo contempla la posible producción de un pseudo-escalar, sino su interacción con el bosón de Higgs.

En este trabajo se presenta el desarrollo de una búsqueda de un par de bosones pseudo-escalares en el rango de masas de 3.6 a 23 GeVs, producidos a partir del decaimiento de un bosón de Higgs ($H \rightarrow aa$), y decayendo a un par de muones y a un par de taus: $H \rightarrow aa \rightarrow 2\mu + 2\tau$. La limpia reconstrucción de muones en ATLAS permite, de existir la resonancia, determinar su masa invariante por medio del decaimiento $a \rightarrow \mu\mu$, mientras que la alta probabilidad del decaimiento $a \rightarrow \tau\tau$ incrementa la probabilidad de producción de este estado final. Debido a la gran disparidad entre la masa del bosón de Higgs (125 GeV) y las resonancias escalares livianas, estas últimas se producirían con un elevado *boost*, por lo que el par de taus en el estado final se observarían solapados entre sí en el detector. Esta condición requiere de tratamientos especiales en el estudio de los pares de taus, lo que constituye la principal dificultad del análisis.

En la búsqueda de Nueva Física, resulta también muy importante la reconstrucción e identificación eficiente de taus decayendo hadrónicamente en el Trigger del experimento, responsable de preseleccionar rápidamente colisiones de potencial interés para su registro y posterior análisis. Nuevos algoritmos de discriminación de taus utilizando Graph-Neural-Networks y mejoras en las técnicas de reconstrucción fueron recientemente implementados, y se encuentran actualmente en uso en ATLAS. En el presente trabajo, describiremos brevemente el desarrollo de estas técnicas y su performance durante las primeras semanas de funcionamiento del experimento con colisiones de protones de alta intensidad.

Optimización mecanobiológica de estructuras 3D porosas para osteointegración mediante aprendizaje estadístico, deep Learning y simulación mecánica computacional

F. A. PEDEMONTE^{1,2}, M. CAVALIERE², V. E. BOSIO¹

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

² *Facultad de Ingeniería, Universidad Austral, Pilar, Buenos Aires, Argentina*

email: fpedemonte@austral.edu.ar

El diseño de implantes ortopédicos que aseguren una integración ósea exitosa y una distribución de cargas fisiológica óptima en la interface hueso/implante representa un desafío crítico en la medicina regenerativa actual. El uso de manufactura aditiva (impresión 3D) ha abierto numerosas posibilidades para la creación de estructuras porosas con este fin. No obstante, la optimización de la porosidad y la arquitectura interna de estas estructuras 3D ha dependido históricamente de métodos iterativos y empíricos, lo que ha generado resultados con alto grado de inconsistencia; siendo inexistente un consenso a este respecto. Este trabajo presenta un enfoque innovador para la optimización mecanobiológica de estructuras 3D porosas para uso en diseño de implantes ortopédicos, mediante la integración de métodos generativos basados en aprendizaje estadístico (Statistical Shape Models, SSMs), aprendizaje profundo (Deep Learning) y Simulación Mecánica Computacional (Finite Element Analysis, FEA). Los resultados obtenidos hasta el momento indican que esta metodología permite determinar parámetros clave para definir estructuras óptimas; contribuyendo al desarrollo de implantes con diseño orientado a la regeneración ósea, más seguros, eficaces y personalizados, demostrando así un gran potencial para mejorar significativamente los resultados clínicos actuales. [1].

Referencias

- [1] Pedemonte, F. A., Cavaliere, M., & Bosio, V. E. (2024). Diseño de estructuras porosas para regeneración ósea a partir de un modelo de aprendizaje inteligente y simulación mecánica computacional. En C.I. Pairetti, M.A. Pucheta, M.A. Storti, C.M. Venier (Eds.), *Mecánica Computacional*, XLI, 913-922. <https://doi.org/10.70567/mc.v41i17.90>.

Uso de simetrías para el cálculo de correladores en teorías conformes de campos

M. LAGARES¹, G. BLIARD², D. CORREA¹ I. SALAZAR LANDEA¹

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),*

Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina

² *Laboratoire de Physique, École Normale Supérieure, Université PSL, CNRS, Sorbonne Université,
Université Paris Cité, 24 rue Lhomond, F-75005 Paris, France*

email: martinlagares95@gmail.com

El paradigma actual para el estudio perturbativo de teorías cuánticas de campos en el régimen de acoplamiento débil consiste en el uso de expansiones en diagramas de Feynman. A pesar de las muchas virtudes de este formalismo, la dificultad en el cálculo de los diagramas incrementa rápidamente al explorar órdenes subdominantes en la expansión. Problemas similares se observan en el régimen de acoplamiento fuerte de teorías con duales holográficos, en el cual la expansión perturbativa se organiza en términos de diagramas de Witten. En este contexto, las técnicas de *bootstrap* conforme analítico proveen una alternativa interesante para el cálculo perturbativo de funciones de correlación en teorías cuánticas de campos con simetría conforme, puesto que permiten la obtención de los mismos utilizando únicamente ciertas condiciones de consistencia y las restricciones impuestas por la simetría de la teoría. En esta charla discutiré los fundamentos del *bootstrap* conforme analítico y presentaré los resultados de [1], en el cual utilizamos dicho método para estudiar correladores a lo largo de defectos de línea conformes y en el contexto de dualidades $\text{AdS}_3/\text{CFT}_2$.

Referencias

- [1] G. Bliard, D. H. Correa, M. Lagares and I. Salazar Landea, JHEP **01**, 131 (2025), [https://doi:10.1007/JHEP01\(2025\)131](https://doi.org/10.1007/JHEP01(2025)131) [arXiv:2410.02685 [hep-th]].

Formalismo línea de mundo y su aplicación a problemas con bordes

S. CHRISTIANSEN MURGUIZUR¹, P. PISANI¹, L. MANZO¹

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

email: santiago.christiansen@fisica.unlp.edu.ar

El formalismo línea de mundo es el uso de las integrales de camino propias de la mecánica cuántica no relativista en el marco de la teoría cuántica de campos. Ha probado ser una herramienta valiosa para el cálculo eficiente de amplitudes de dispersión en teorías de gauge y para el estudio de teorías de campos en presencia de campos clásicos de fondo y, más recientemente, bordes.

En esta charla se dará una introducción al formalismo línea de mundo y su aplicación a problemas con bordes. Centrándose en el caso de teorías de Yang-Mills y presentando algunas aplicaciones.

Incertidumbres en la determinación de observables de radio de lluvias de rayos cósmicos asociadas con los modelos de simulación: CoREAS y ZHAireS

C. S. CRUZ SANCHEZ^{1,2}, P. M. HANSEN^{1,2},

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

² *Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería, UNLP, La Plata, Argentina*

email: carlo.cruz@iflp.unlp.edu.ar

La detección de lluvias atmosféricas extensas (EAS) inducidas por rayos cósmicos mediante señales de radio ha experimentado avances significativos en las últimas dos décadas. Numerosos experimentos de rayos cósmicos de ultra alta energía registran rutinariamente pulsos de radio en el rango de frecuencias de MHz a GHz, emitidos por estas lluvias. La simulación Monte Carlo de dichos pulsos es fundamental para reconstruir con precisión la energía primaria del rayo cósmico e inferir la composición de las partículas incidentes. En este trabajo se presenta una comparación detallada del campo eléctrico predicho en lluvias simuladas con CoREAS y ZHAireS, con el objetivo de estimar las incertidumbres sistemáticas asociadas a los modelos de simulación en la determinación de dos observables clave: la energía electromagnética y la profundidad máxima de desarrollo (X_{\max}). Para ello, se emplearon parámetros de entrada y configuraciones lo más similares posible en ambos programas, incluyendo un mismo perfil de índice de refracción atmosférico realista dependiente de la altitud, esencial para una predicción precisa de la emisión de radio. Además, se seleccionaron eventos simulados con valores similares de X_{\max} . Los resultados muestran un buen acuerdo entre CoREAS y ZHAireS, con discrepancias en los componentes dominantes del campo eléctrico generalmente por debajo del 10 % en el rango de frecuencias de unos pocos MHz a cientos de MHz —relevante para la mayoría de los experimentos de detección de radio—, lo que se traduce en incertidumbres inferiores al 5 % en la estimación de la energía y de aproximadamente 10 g/cm² en X_{\max} . [1].

Referencias

- [1] C. S. Cruz Sanchez, P. M. Hansen, M. Tueros, J. Alvarez-Muñiz, and D. G. Melo, *Uncertainties in the Estimation of Air Shower Observables from Monte Carlo Simulation of Radio Emission*, arXiv:2505.08920 [astro-ph.HE], 2025.

Vértices desplazados de neutrinos estériles en el LHC

S. TANCO¹, A. MEDINA¹, S. LAVIGNAC² N. MILEO¹

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

² *Institut de Physique Théorique (IPhT), Université Paris Saclay, CNRS, CEA, F-91191 Gif-sur-Yvette,
France*

email: santiago.tanco@fisica.unlp.edu.ar

Una de las preguntas más relevantes en el contexto de la física de partículas es el origen de la masa no nula de los neutrinos, que se observa a partir del descubrimiento de sus oscilaciones de sabor leptónico. El mecanismo de *see-saw* tipo I provee una forma simple de generar las masas de los neutrinos livianos mediante la incorporación de neutrinos estériles N , e introduce ángulos de mezcla estéril-activo que podrían ser medidos a través de la producción de N en colisionadores hadrónicos. Sin embargo, la sección eficaz de estos procesos está naturalmente suprimida debido al pequeño valor de estos ángulos de mezcla. Esto no ocurre, en cambio, en modelos donde el neutrino estéril se produce por el decaimiento de un nuevo estado más pesado, cuya sección eficaz de producción puede ser del orden electrodébil. Estudiamos un ejemplo concreto de este escenario [1], que es una extensión del Modelo Estándar Supersimétrico Mínimo (MSSM), donde el neutrino estéril corresponde al compañero fermiónico del bosón de pseudo-Nambu-Goldstone asociado a una simetría global $U(1)_R$ espontáneamente rota. Los electroweakinos neutros del MSSM se mezclan con el neutrino estéril y los neutrinos del SM, con una estructura fuertemente jerárquica que permite obtener la matriz de masa de los neutrinos activos mediante un mecanismo tipo *see-saw*. La producción de dos neutralinos pesados es del orden electrodébil, y estos decaen cada uno a un N cuyo ancho de decaimiento es tal que puede producir naturalmente vértices desplazados. Presentamos un estudio del alcance del LHC para estas señales de vértices desplazados con estados finales hadrónicos, a partir de implementar tablas de eficiencias de reconstrucción provistas por la colaboración ATLAS [2]. Obtenemos las regiones excluidas del espacio de parámetros, así como las perspectivas a luminosidades de 300 fb^{-1} y 3000 fb^{-1} . Finalmente, discutimos la generalización de nuestros resultados a modelos más allá del contexto de supersimetría.

Referencias

- [1] Lavignac, S., & Medina, A. D. (2021). Displaced vertex signatures of a pseudo-Goldstone sterile neutrino. *Journal of High Energy Physics*, 2021(1). doi:10.1007/jhep01(2021)151
- [2] The ATLAS collaboration, Aad, G., Abbott, B., Abbott, D. C., Abeling, K., Abidi, S. H., ... Zwalinski, L. (2023). Search for long-lived, massive particles in events with displaced vertices and multiple jets in pp collisions at $\sqrt{s} = 13 \text{ TeV}$ with the ATLAS detector. *Journal of High Energy Physics*, 2023(6). doi:10.1007/jhep06(2023)200

Solitones en tras-poliacetileno

T. SULEIMAN¹, A. IUCCI¹, A. LOBOS²

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

² *Instituto Interdisciplinario de Ciencias Básicas (CONICET-UNCuyo)*

email: tsuleiman@iflp.unlp.edu.ar

El trans-poliacetileno (tPA), una cadena lineal de carbonos con enlaces dobles y simples alternados, fue el primer polímero orgánico en exhibir propiedades conductoras. Su estructura de dobles enlaces alternados permite la formación de solitones —deformaciones no lineales que transportan carga y espín—, y es la responsable de su capacidad de conducción. Estas excitaciones de carácter topológico fueron predichas teóricamente en los años 70, para luego ser experimentalmente mediante espectroscopías ópticas y de resonancia magnética. Recientemente, avances en técnicas de nanofabricación, como la síntesis de cadenas moleculares individuales sobre superficies metálicas (STM), han revivido el interés en estos sistemas, abriendo nuevas posibilidades para manipular solitones en dispositivos a escala molecular.

En este trabajo, abordamos teóricamente el estudio una cadena de tPA acoplada a un pozo de potencial externo. Mediante la técnica de bosonización para resolvemos las ecuaciones de movimiento clásicas del sistema, con el objetivo de caracterizar las distintas soluciones según su topología. La ventaja de la bosonización radica en la simplicidad que aporta a la hora de considerar interacciones electrón-electrón, las cuales pueden ser incluidas sin perder la potencialidad de resolver analíticamente las ecuaciones de movimiento. Nuestro objetivo es, mediante un parámetro experimentalmente accesible, generar transiciones de fase topológicas.

Formalismo de estados historia para series temporales

F. LOMOC¹, N. CANOSA¹, R. ROSSIGNOLI^{1,2}

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

² *Comisión de Investigaciones Científicas (CIC)*

email: ferlomoc@fisica.unlp.edu.ar

Presentamos un método para interpretar series temporales empleando el formalismo de estados historia en mecánica cuántica. Este formalismo permite describir la evolución completa de un sistema en base a un único estado, el estado historia, que incluye simultáneamente al sistema cuántico y a un reloj de referencia (considerado como un sistema cuántico). Esto conduce al concepto de entrelazamiento sistema-tiempo.

En nuestro caso, interpretamos a la serie temporal como una serie de estados cuánticos coherentes, lo que permite definir al estado historia. El grado de evolución del sistema se puede medir así a través de dicho entrelazamiento, que da cuenta del número efectivo de estados ortogonales visitados por el sistema en dicha historia. A través de medidas entrópicas se cuantifica el entrelazamiento, que dependen del overlap entre los distintos estados visitados.

Como aplicación, con estas herramientas desarrollamos un indicador de volatilidad de distintos activos financieros, que se compara con la medida estándar de volatilidad, el índice VIX. Además, analizamos el espectro de la matriz de overlap para distintos períodos, el cual da cuenta de las fluctuaciones de dichos activos, proporcionando un indicador satisfactorio de las fluctuaciones bruscas en el comportamiento de los precios.

Mostramos que nuestra medida podría proporcionar un indicador de volatilidad alternativo, más general y accesible frente a indicadores estándar.

Estrellas holográficas y transiciones de fase

L. ACITO¹, N. GRANDI¹,

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

email: acitolucas@iflp.unlp.edu.ar

Estudiamos aplicaciones concretas de la dualidad AdS/CFT, o también llamada “holografía”, donde soluciones de gravedad en un espacio asintóticamente Anti de Sitter en d dimensiones (AdS_d) están correlacionadas con una teoría de campos conforme que vive en el borde en $d-1$ dimensiones. En particular, estudiamos la termodinámica de un sistema autogravitatorio de fermiones cargados a temperatura finita asintóticamente AdS_4 , conocidas como estrellas holográficas. Consideramos un fluido perfecto que satisface el equilibrio termodinámico en un espacio-tiempo curvo, y resolvemos las ecuaciones de Tolman-Oppenheimer-Volkov. Obtenemos los perfiles de densidad en el bulk de AdS y encontramos que la estrella de electrones tiene una transición de fase a un agujero negro de Reissner-Norström. Esta transición de fase que se observa en el bulk tiene su correspondencia en el borde, la cual se interpreta como una transición a un sólido superconductor en la CFT.

Dispersión 2 a 2 en el límite de altas energías desde amplitudes de dispersión en la teoría de supercuerdas del tipo IIB

M. PARLANTI¹, M. SCHVELLINGER¹, L. MARTIN¹

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

email:martin.parlanti@fisica.unlp.edu.ar

En el estudio de procesos de dispersión para altas energías desde la teoría de supercuerdas se obtiene un comportamiento *soft* en la amplitud respecto a la energía de centro de masa, y por lo tanto no se reproduce el comportamiento *hard* de la fenomenología de la física de partículas. En un trabajo pionero del 2002 [1], Polchinski y Strassler encuentran un *ansatz* con el cual logran obtener este comportamiento *hard* para procesos 2 a m glueballs, los cuales son duales a estados de cuerdas cerradas mediante el uso de la conjetura de Maldacena. En este trabajo se analizan con mayor detalle procesos de dispersión 2 a 2 glueballs y también 2 a 2 fermiones de spin $1/2$ en el modelo *hardwall* desde la dualidad AdS/CFT. Se estudiaron dos límites: procesos para ángulo fijo y el límite de Regge. Entendemos los glueballs y los fermiones como los estados correspondientes que son creados por operadores de la teoría $\mathcal{N} = 4$ SYM $D = 4$ y los cuales son duales a cuerdas cerradas que corresponden a dilatones y a dilatinos en la teoría de supercuerdas del tipo IIB. Se obtiene comportamiento *hard* para ambos casos en el proceso de ángulo fijo y en el límite de Regge se reproduce el resultado de la propagación de un gravitón reggeizado en la dispersión de cuatro dilatones y también de un modo vectorial en la dispersión de cuatro dilatinos [2].

Referencias

- [1] Polchinski, J., & Strassler, M. J. (2002). Hard scattering and gauge/string duality. *Physical Review Letters*, 88(3), 031601.
- [2] Martin, L., Parlanti, M., & Schvellinger, M. (2025). Fermions hard scattering from superstrings. *Physical Review D*, 111(6), 066004.

Relación de incerteza para sistemas con hamiltonianos PT-simétricos

Y. ALVAREZ¹, M. PORTESI¹, M. REBOIRO¹

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

email: yalvarez@iflp.unlp.edu.ar

El principio de incerteza, formulado originalmente por Heisenberg para observables incompatibles, establece que la precisión con la que dos de estos observables pueden medirse simultáneamente está limitada por una cota inferior del orden de \hbar en el producto de sus desviaciones estándar; Robertson extendió este resultado a una formulación general válida para cualquier par de observables no conmutativos. Analizaremos cómo dicha relación se modifica en sistemas cuánticos descritos por Hamiltonianos no Hermíticos con simetría PT. Este tipo de Hamiltonianos ha adquirido un interés creciente debido a su relevancia experimental: sistemas ópticos con ganancias y pérdidas balanceadas, que implementan Hamiltonianos PT-simétricos, han sido realizados en laboratorio y permiten observar efectos como la ruptura de simetría PT y la propagación unidireccional de luz. Estos desarrollos invitan a reconsiderar fundamentos de la teoría cuántica en contextos más generales que los ofrecidos por la Hermiticidad estándar. Mostraremos que, para preservar una interpretación física coherente en estos sistemas, es necesario redefinir el producto interno mediante una métrica definida positiva, lo que lleva a la formulación de una relación de incerteza generalizada adaptada al marco de la cuasi-Hermiticidad. Desde el punto de vista matemático, este enfoque se apoya en avances en teoría espectral y espacios de Krein, que permiten tratar Hamiltonianos no diagonalizables mediante formas canónicas de Jordan y métricas modificadas.

Referencias

- [1] R. Ramírez and M. Reboiro. *Dynamics of finite dimensional non-hermitian systems with indefinite metric* J. Math. Phys **60**, 012106 (2019).
- [2] Wei-Chao Gao, Chao Zheng, Lu Liu, Tie-Jun Wang, and Chuan Wang. *Experimental simulation of the parity-time symmetric dynamics using photonic qubits*. Opt. Express **29**, 517–526 (2021).
- [3] N. Shukla, R. Modak, and B. P. Mandal. *Uncertainty relation for non-Hermitian systems*. Phy. Rev. A, **107**, 042201 (2023).

Problemas con borde en teoría cuántica de campos

L. MANZO¹, P. PISANI¹,

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

email: lucasmanzo@fisica.unlp.edu.ar

En esta charla se comentará brevemente sobre algunos problemas de interés actual en teoría cuántica de campos sobre espacios con borde. El foco estará puesto en dar una descripción cualitativa del efecto Casimir, de los dispositivos de grafeno y de los horizontes de eventos. Finalmente, se comentará brevemente con base en [1, 2] sobre una manera de encarar estos problemas utilizando el formalismo línea de mundo.

Referencias

- [1] Manzo, L. (2024). Worldline approach for spinor fields in manifolds with boundaries. *JHEP* 2024(144).
- [2] Christiansen Murguizur, S., Manzo, L. y Pisani, P. *Trabajo en progreso*.

Adsorción de nitrobencono sobre $\text{TiO}_2(101)$ anatasa: protonización superficial y vacancias de O

J. A. ZÚÑIGA¹, A. V. GIL REBAZA¹, J. A. RENGIFO-HERRERA²

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), 1900 La Plata, Argentina*

² *Laboratory of Advanced Oxidation Processes and Photocatalysis (LAPh),
Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas “Dr. Jorge J. Ronco” (CINDECA)-CONICET,
Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 1900 La Plata, Argentina*

email: jzuniga@iflp.unlp.edu.ar

En los últimos años la implementación de nuevas técnicas y tecnologías que permiten reducir los problemas ambientales ocasionados en la síntesis fotocatalítica de compuestos orgánicos, han generado gran interés en estudios experimentales y teóricos relacionados con la industria química, como es el caso de la reducción fotocatalítica de nitrobencono $\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2$ (NB) a anilina en la superficie (110) de TiO_2 en fase rutilo [1]. En consecuencia, en este trabajo se presenta un estudio teórico soportado en resultados experimentales (UV-vis y ESR) de la adsorción del NB en la superficie (101) de la nanopartícula de TiO_2 en fase anatasa, visitando sitios superficiales de Ti, O y vacancias de O (Vo) [2, 3], teniendo en cuenta la protonización en la superficie del semiconductor en mención debido a la técnica de crecimiento que se utiliza.

Los cálculos fueron realizados con el marco de la teoría funcional densidad (DFT) usando el método de pseudopotenciales + ondas planas (VASP), la parte de intercambio correlación fue descrita por la parametrización de Perdew-Burke-Ernzerhof [4] de la aproximación del gradiente generalizado (GGA-PBE), además se consideraron interacciones tipo van der Waals (rvv10) [5]. Las curvas de energía potencial vs distancia que describen la interacción molécula-superficie han sido ajustadas con el potencial Coulomb-Buckingham (CB) [6] permitiendo así obtener tanto la energía de adsorción como la distancia de enlace. De los resultados obtenidos la adsorción de NB en posición vertical sobre TiO_2 es más favorable cuando se considera Vo y protonización superficial.

Referencias

- [1] Ji, T., Fan, Y., & Luo, Y. (2019). First-principles study on the mechanism of photocatalytic reduction of nitrobenzene on the rutile $\text{TiO}_2(110)$ surface. *Physical Chemistry Chemical Physics*. <https://doi.org/10.1039/c9cp05010h>.
- [2] Wang, S., Li, G., & Leung, M. K. H. (2017). Controlling charge transfer in quantum-size titania for photocatalytic applications. *Applied Catalysis B: Environmental*, 215, 85–92. <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2017.05.043>

- [3] Serpone, N. (2006). Is the band gap of pristine TiO_2 narrowed by anion- and cation-doping of titanium dioxide in second-generation photocatalysts? *The Journal of Physical Chemistry B*, 110(48), 24287–24293. <https://doi.org/10.1021/jp065659r>
- [4] Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). Generalized gradient approximation made simple. *Physical Review Letters*, 77(18), 3865–3868. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
- [5] Sabatini, R., Gorni, T., & de Gironcoli, S. (2013). Nonlocal van der Waals density functional made simple and efficient. *Physical Review B*, 87(4), 041108(R). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.041108>
- [6] Müser, M. H., Sukhomlinov, S. V., & Pastewka, L. (2022). Interatomic potentials: Achievements and challenges. *Advanced Physics: X*, 7(1), 1–120. <https://doi.org/10.1080/23746149.2022.2093129>

Una pizca de resurgencia y formalismo línea de mundo

U. WAINSTEIN HAIMOVICH¹, P. A. G. PISANI¹,

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

email: ulises2357@iflp.unlp.edu.ar

Vamos a hablar un poco sobre resurgencia y formalismo línea de mundo. La resurgencia son unas técnicas para estudiar las teorías de campos que reinterpretan la información que nos proveen tanto la teoría de perturbaciones y las contribuciones semiclásicas por medio de el análisis dado por teoría de Picard-Lefschetz, las transformadas de Borel-Le Roy, y las trans-series de Ecalle[1, 2]. El formalismo línea de mundo es un formalismo que utiliza cierta equivalencia entre propagadores en campos de fondo y partículas relativistas de propiedades similares en campos de fondo, lo que permite atacar problemas de teoría de campos como problemas de mecánica cuántica/integral de caminos para teorías en 0+1 dimensiones.[3].

Referencias

- [1] Serone, M., Spada, G., Villadoro, G. (2017). The power of perturbation theory. *Journal of High Energy Physics*, 2017(5), 1-41.
- [2] Dorigoni, D. (2019). An introduction to resurgence, trans-series and alien calculus. *Annals of Physics*, 409, 167914.
- [3] Dunne, G. V., Schubert, C. (2005). Worldline instantons and pair production in inhomogenous fields. *Physical Review D—Particles, Fields, Gravitation, and Cosmology*, 72(10), 105004.

Cálculo de la amplitud de dispersión de dilatón-dilatino a dilatón-dilatino en la teoría de supercuerdas del tipo IIB y aplicaciones a la dinámica de glueball-protón

L. MARTÍN¹, M. SCHVELLINGER¹, M. PARLANTI²

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

² *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina
email:lucasmartinar@iflp.unlp.edu.ar*

Hacemos una derivación explícita de la amplitud de dispersión dilatón–dilatino a dilatón–dilatino en la teoría de supercuerdas tipo II. La amplitud se obtiene utilizando las relaciones de Kawai–Lewellen–Tye (KLT), que expresan las amplitudes de cuerdas cerradas en términos de productos de amplitudes de cuerdas abiertas. Analizamos su comportamiento en el límite de Regge y ángulo fijo. Además, calculamos la amplitud de dispersión de tipo hard scattering entre glueballs y fermiones a partir de la amplitud de cuerdas cerradas dilatón–dilatino dentro de la teoría de supercuerdas tipo IIB, en el contexto de la dualidad gauge/strings. Examinamos su comportamiento de altas energías a ángulo fijo y en el régimen de Regge.

Referencias

- [1] H. Kawai, D. C. Lewellen and S. H. H. Tye, “A Relation Between Tree Amplitudes of Closed and Open Strings,” Nucl. Phys. B **269**, 1-23 (1986) doi:10.1016/0550-3213(86)90362-7
- [2] J. H. Schwarz, “Superstring Theory,” Phys. Rept. **89**, 223-322 (1982) doi:10.1016/0370-1573(82)90087-4
- [3] J. J. Atick and A. Sen, “Covariant One Loop Fermion Emission Amplitudes in Closed String Theories,” Nucl. Phys. B **293**, 317-347 (1987) doi:10.1016/0550-3213(87)90075-7
- [4] L. Brink, D. I. Olive, C. Rebbi and J. Scherk, “The Missing Gauge Conditions for the Dual Fermion Emission Vertex and Their Consequences,” Phys. Lett. B **45**, 379-383 (1973) doi:10.1016/0370-2693(73)90060-9
- [5] M. B. Green, J. H. Schwarz and E. Witten, “SUPERSTRING THEORY. VOL. 1: INTRODUCTION,” 1988, ISBN 978-0-521-35752-4
- [6] K. Becker, M. Becker, I. V. Melnikov, D. Robbins and A. B. Royston, “Some tree-level string amplitudes in the NSR formalism,” JHEP **12**, 010 (2015) doi:10.1007/JHEP12(2015)010 [arXiv:1507.02172 [hep-th]].

- [7] D. J. Gross and J. H. Sloan, “The Quartic Effective Action for the Heterotic String,” Nucl. Phys. B **291**, 41-89 (1987) doi:10.1016/0550-3213(87)90465-2
- [8] M. R. Garousi and R. C. Myers, “Superstring scattering from D-branes,” Nucl. Phys. B **475**, 193-224 (1996) doi:10.1016/0550-3213(96)00316-1 [arXiv:hep-th/9603194 [hep-th]].
- [9] L. Martin, M. Parlanti, and M. Schvellinger. ”Four-dilatino superstring theory scattering amplitude and its Regge behavior,.”arXiv preprint arXiv:2503.19150 (2025).

Heteroestructuras de grafeno y ZnO para la remoción de colorantes orgánicos

L. MELIA^{1,2}, M.V. GALLEGOS³, L. JUNCAL¹, S. RABAL¹, D. MUÑETÓN⁴, M. MEYER¹, F. IBAÑEZ⁴, L. DAMONTE¹

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP), Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata 1900, Argentina.*

² *Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata, La Plata, Argentina.*

³ *Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas (CINDECA) CONICET-UNLP-CIC, La Plata 1900, Argentina.*

⁴ *Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas, Teóricas y Aplicadas (INIFTA), UNLP-CONICET, La Plata 1900, Argentina.*

email: lmelia@iflp.unlp.edu.ar

En este trabajo se presentan heteroestructuras de ZnO crecidas sobre espuma de Ni con grafeno (G), obtenido mediante deposición química en fase vapor (CVD). Las muestras fueron preparadas por electrodeposición sin la necesidad de capas semilla, lo que evidencia la buena compatibilidad del método con sustratos recubiertos de grafeno. La caracterización estructural y morfológica se llevó a cabo mediante difracción de rayos X, microscopía electrónica de barrido con EDS y espectroscopía Raman. Los resultados muestran que la incorporación de grafeno mejora significativamente la nucleación y el crecimiento de ZnO, permitiendo una deposición más eficiente a potenciales bajos y una cobertura homogénea de la superficie, en contraste con la espuma de Ni sin modificar. La muestra Ni/G/ZnO mostró un desempeño fotocatalítico destacado frente a la degradación del azul de metileno (MB) bajo iluminación UV, logrando una remoción cercana al 60 %, el doble que otros sistemas evaluados. Este comportamiento mejorado se atribuye a los efectos sinérgicos en la interfase ZnO/grafeno, donde la alta movilidad electrónica del grafeno favorece la separación de cargas foto-inducidas y mejora tanto la adsorción del colorante como la eficiencia catalítica global. La estrategia propuesta combina materiales económicos, métodos de bajo costo y parámetros simples, lo que la convierte en una alternativa promisorio para el tratamiento de efluentes con colorantes orgánicos. Además, el uso de grafeno como soporte no solo evita el uso de precursores tóxicos, sino que también mejora notablemente la funcionalidad del material compuesto.

NPM para aplicaciones biomédicas: determinación experimental del tiempo de relajación y potencia disipada ante la exposición a campos magnéticos de radiofrecuencia

G. A. BASSO^{1,2}, I. J. BRUVERA^{1,2}, P. MENDOZA ZÉLIS^{1,3}

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP), Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

² *Depto. de Física, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, La Plata, Argentina*

³ *Depto. de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería, UNLP, La Plata, Argentina*

email: giuliano.basso@fisica.unlp.edu.ar

La disipación de potencia por nanopartículas magnéticas (NPM) expuestas a campos de radiofrecuencia (RF) ha permitido el desarrollo de diversas aplicaciones en biomedicina, tales como descongelamiento de tejidos criopreservados [1], termoterapia oncológica [2] y liberación controlada de fármacos [3]. En estas aplicaciones, las NPM absorben energía del campo y la liberan a su entorno en forma de calor. El factor de mérito para este proceso se denomina *Tasa de Absorción Específica* (SAR, por sus siglas en inglés) y representa la potencia disipada por unidad de masa de NPM a una dada amplitud y frecuencia de campo RF. La disipación de potencia tiene origen en el retraso de la magnetización del sistema $M(t)$ con respecto al campo aplicado $H(t)$, siendo el parámetro que caracteriza este fenómeno el tiempo de relajación τ del sistema.

Recientemente, nuestro grupo ha demostrado que al considerar un sistema magnético dotado de una respuesta $M(t)$ con simetría impar en la dirección del campo aplicado $H(t)$, y tal que su dinámica está determinada por la ecuación de relajación de Shliomis [4], τ y SAR se pueden calcular a partir de la amplitud c_1 y fase ϕ_1 del primer armónico de la magnetización $M(t)$ de acuerdo con:

$$\tau = \frac{\tan(\phi_1)}{2\pi f_1} \quad SAR = \frac{1}{2}\mu_0 H_0 M_s c_1 \sin(\phi_1)$$

En este trabajo se muestran los resultados de emplear esta metodología de análisis en dos tipos de sistemas magnéticos: por un lado, en coloides de base acuosa para estudiar la relajación y la disipación de las NPM durante la transición de fase sólida-líquida de la matriz; y en ferrogel termosenesibles para estudiar la disipación mediada por NPM y el rendimiento de estos sistemas para potenciales aplicaciones tecnológicas.

Referencias

- [1] Han, Z., et al. Nature communications, 14(1), 3407, 2023.
- [2] Stephen, Z. et al. Advanced healthcare materials, 10(2), 2001415, 2021.
- [3] Bruvera, I. et al. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 377, 446-451, 2015.

- [4] Rosensweig, E. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 252:370–374, 2002.

Modelado DFT de materiales termoeléctricos: $\text{Ge}_{18}\text{Sb}_9\text{Te}_{32}$ y $\text{Ge}_{13}\text{Sb}_9\text{Sn}_5\text{Te}_{32}$

S. L. CHUCCHUCAN GONZALEZ¹, L. ERRICO¹, A. M. MUDARRA NAVARRO²

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

email: lchucchucan@iflp.unlp.edu.ar

Las crecientes exigencias energéticas y el impacto ambiental de los combustibles fósiles han convertido la búsqueda de fuentes de energía alternativas en uno de los principales retos del siglo XXI. Las actuales fuentes alternativas y amigables con el medio ambiente están lejos de competir adecuadamente con las convencionales. Por esto, los esfuerzos se centran no solo en posibles sustitutos de los combustibles fósiles sino también en mejorar eficiencias (en las tecnologías convencionales, más del 60 % de la energía primaria se pierde como calor residual). En este contexto, los materiales termoeléctricos (TE) han atraído mucha atención por su capacidad para convertir el calor disipado/emitado por diversas fuentes en energía útil (electricidad), con la ventaja que no utiliza piezas móviles, es silenciosa, de fácil mantenimiento, apta para miniaturización y amigable con el medio ambiente. La eficiencia de los materiales TE se mide en términos de un parámetro, $ZT = \alpha^2 T \sigma / k$. α es el coeficiente de Seebeck, σ y k las conductividades eléctrica y térmica y T la temperatura. Un valor de alto de α asegura un gran potencial/termovoltaje, un bajo valor de ρ es necesario para minimizar el calentamiento Joule y una baja k para crear un gradiente alto de temperatura. La correlación entre estas magnitudes dificulta predecir ZT , por lo cual el modelado teórico podría ser de gran ayuda, esclareciendo la relación estructura-densidad de carga electrónica y el papel de defectos y dopantes en las propiedades termoeléctricas. Los compuestos basados en GeTe presentan altos ZT en el rango de temperatura intermedio, pero una estabilidad térmica deficiente y alta concentración de vacancias de Ge, que reducen ZT . El dopaje con Sb es una estrategia ampliamente utilizada para mejorar las propiedades termoeléctricas, ya que resulta en una reducción de k . Además, se ha logrado la mejora simultánea de α y ρ al co-doparlos con Sn. En un estudio previo presentamos un estudio experimental (DRX, Mössbauer) y DFT de la estabilidad y las propiedades estructurales e hiperfinas de aleaciones con composiciones nominales $\text{Ge}_{18}\text{Sb}_9\text{Te}_{32}$ y $\text{Ge}_{13}\text{Sb}_9\text{Sn}_5\text{Te}_{32}$ en fase cúbica y trigonal. Presentamos aquí nuestros resultados para las propiedades electrónicas y termoeléctricas de estas aleaciones. En particular, mostramos como la estructura, vacancias de Ge y el codopaje con Sb y Sn afectan al ZT y cómo éste depende la distribución de vacancias y dopantes.

Restauración funcional cortical y plasticidad de los campos receptivos visuales

N. GUISANDE¹, F. MONTANI¹

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

email: guisande.natali@fisica.unlp.edu.ar
f.montani@fisica.unlp.edu.ar

Frente a lesiones corticales, el sistema visual humano puede adaptarse gracias a su plasticidad, es decir, su capacidad para reorganizarse y compensar funciones perdidas. Se ha propuesto que el entrenamiento visual activa funciones remanentes mediante vías secundarias intactas, induciendo cambios plásticos en áreas corticales perilesionales que mejoran la representación del campo visual afectado [6, 7]. Esta capacidad de reorganización abre nuevas posibilidades para la recuperación visual postlesión y ha impulsado el desarrollo de modelos orientados a comprender estos mecanismos de compensación cortical.

En esta charla se presenta un modelo computacional que simula la restauración funcional en la corteza visual primaria (V1) tras una lesión focal, analizando la reorganización de los campos receptivos perilesionales. Se modelan campos receptivos como funciones gaussianas [5] y de Gabor dentro de una población neuronal organizada retinotópicamente. Tras la inducción de una lesión, se implementan mecanismos de expansión orientada y rotación asimétrica de los campos receptivos, permitiendo que las neuronas sanas adyacentes a la lesión cubran el área afectada. La restauración funcional se evalúa conectando la salida de estos campos con una población de neuronas corticales modeladas mediante el formalismo de Izhikevich [1].

A partir de las señales generadas, se calcula la entropía de Shannon [2], la complejidad estadística MPR [4] y la información de Fisher [3] para distintos ritmos cerebrales. Los resultados muestran que la expansión de campos receptivos perilesionales compensa funcionalmente el daño cortical y altera la dinámica neuronal, especialmente en frecuencias altas, donde emergen patrones más complejos y ruidosos a mayor grado de lesión.

Referencias

- [1] E. M. Izhikevich, “Simple model of spiking neurons”, *IEEE Transactions on Neural Networks*, vol. 14, no. 6, pp. 1569–1572, 2003. Available: <http://dx.doi.org/10.1109/TNN.2003.820440>
- [2] C. E. Shannon, “A mathematical theory of communication”, *The Bell System Technical Journal*, vol. 27, pp. 379–423, 1948.
- [3] R. A. Fisher, “On the mathematical foundations of theoretical statistics”, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A*, vol. 222, pp. 309–368, 1922.

- [4] Rosso, O.A., De Micco, L., Larrondo, H.A., Martín, M.T. & Plastino, A. (2010). Generalized Statistical Complexity Measure. *International Journal of Bifurcation and Chaos*, **20**(03), 775–785. <http://dx.doi.org/10.1142/S021812741002606X>
- [5] H. Einarsdottir, F. Montani, and S. R. Schultz, “A mathematical model of receptive field reorganization following stroke,” in *2007 IEEE 6th International Conference on Development and Learning*, IEEE, Jul. 2007. Available: <http://dx.doi.org/10.1109/devlrm.2007.4354027>
- [6] A. Barbot, A. Das, M. D. Melnick, M. R. Cavanaugh, E. P. Merriam, D. J. Heeger, and K. R. Huxlin, “Spared perilesional V1 activity underlies training-induced recovery of luminance detection sensitivity in cortically-blind patients,” *Nature Communications*, vol. 12, no. 1, Oct. 2021. Available: <http://dx.doi.org/10.1038/s41467-021-26345-1>
- [7] A. Papanikolaou, G. A. Keliris, T. D. Papageorgiou, Y. Shao, E. Krapp, E. Papageorgiou, K. Stingl, A. Bruckmann, U. Schiefer, N. K. Logothetis, and S. M. Smirnakis, “Population receptive field analysis of the primary visual cortex complements perimetry in patients with homonymous visual field defects,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 111, no. 16, Apr. 2014. Available: <http://dx.doi.org/10.1073/pnas.1317074111>

Factorización generalizada de estados cuánticos y matriz de covarianza

F. PETROVICH¹, R. ROSSIGNOLI¹, N. CANOSA¹

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*
email: federico.petrovich@iflp.unlp.edu.ar

Derivamos un método general que determina las condiciones necesarias y suficientes para que un Hamiltoniano de un sistema interactuante de muchos cuerpos posea un autoestado exacto factorizado, basado en la matriz de covarianza de los operadores locales que lo construyen [1]. El autoestado puede ser un producto de estados de partículas individuales, o también de estados de grupos de partículas (clusters). El formalismo se aplica luego para determinar condiciones generales de dimerización y clusterización exacta en sistemas de espines. Se muestran finalmente resultados ilustrativos y novedosos en sistemas de espines con interacción tipo XYZ en presencia de un campo magnético.

Referencias

- [1] F. Petrovich, R. Rossignoli, N. Canosa, *Physical Review A* **110**, 052213 (2024).

Potenciación del efecto antitumoral mediante hipertermia magnética y un complejo de cobre-hidrazona en cáncer de colon

N. CAPDET¹, L. SANTA MARÍA DE LA PARRA², E. DE SOUSA¹, I. LEÓN², M. TASSO³, P. MENDOZA ZÉLIS¹

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP), Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

² *Centro de Química Inorgánica (CEQUINOR), UNLP, CONICET, afiliado con CIC*

³ *Instituto de Nanosistemas (INS) - Escuela de Bio y Nanotecnología, Universidad Nacional de San Martín (UNSAM) - CONICET*

email: nadiacapdet@iflp.unlp.edu.ar

Los tratamientos convencionales para muchos tumores resultan ineficientes debido a sus efectos adversos y a la resistencia que desarrollan, lo que motiva la búsqueda de nuevas estrategias terapéuticas. En este trabajo se explora la combinación de la hipertermia magnética (HM) con un compuesto antitumoral de cobre-hidrazona para evaluar su eficacia *in vitro* en la línea celular HCT116 de cáncer de colon. La HM emplea nanopartículas magnéticas (NPM) que, al ser sometidas a un campo magnético de radiofrecuencia (CM-RF), generan calor e inducen la muerte celular tumoral [1]. Por otro lado, el complejo $[\text{Cu}(\text{N-N-Fur})(\text{NO}_3)(\text{H}_2\text{O})]$, denominado CuHL, es un agente intercalante del ADN con actividad antitumoral y antimetastásica comprobada en una línea celular de osteosarcoma [2].

Las NPM de óxido de hierro se sintetizaron mediante un método solvotermal en autoclave. Fueron caracterizadas por microscopía electrónica de transmisión (TEM) y magnetometría (VSM), determinándose un tamaño promedio de $30 \pm 4 \text{ nm}$, una magnetización de saturación (M_s) de $96,2 \pm 0,1 \text{ emu/g Fe}_3\text{O}_4$ y una tasa específica de absorción (SAR) de $9,2 \pm 0,3 \text{ W/g Fe}_3\text{O}_4$. La concentración de hierro se cuantificó por espectrofotometría UV.

Se realizaron ensayos de viabilidad celular mediante el método MTT en células HCT116 utilizando: a) el compuesto CuHL, b) las NPM, y c) combinaciones de ambos, en presencia y ausencia de un CM-RF (105 kHz, 9,2 kA/m). CuHL mostró una IC_{50} de $4,4 \pm 0,5 \mu\text{M}$. Las NPM presentaron una IC_{50} de $25 \mu\text{gFe/mL}$ bajo campo magnético. Para los tratamientos combinados se seleccionaron concentraciones inferiores a las IC_{50} individuales.

Los resultados indican que las NPM superparamagnéticas generadas disipan calor eficientemente bajo un CM-RF. La combinación con CuHL mostró un efecto sinérgico, potenciando la actividad individual a partir de $2 \mu\text{M}$ y $10 \mu\text{gFe/mL}$. Se planea extender los estudios a modelos tridimensionales de esferoides tumorales para evaluar esta estrategia en un contexto más representativo del entorno tumoral.

Referencias

- [1] Hildebrandt, B. et al. The cellular and molecular basis of hyperthermia. *Oncology Hematology* **43**, 33–56 (2002).
- [2] Santa María de la Parra, L. et al. Promising Dual Anticancer and Antimetastatic Action by a Cu(II) Complex Derived from Acylhydrazone on Human Osteosarcoma Models. *Inorganic Chemistry* **63**, 4925–4938 (2024).

Determinación del Hamiltoniano a partir de las matrices densidad de M-cuerpos, utilizando técnicas de Machine Learning

A. CIANCIULLI¹, R. ROSSIGNOLI^{1,2}, J.M. MATERA¹

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

² *Comisión de Investigaciones Científicas (CIC)*

email: agustincianciulli@gmail.com

A partir de una representación bipartita de estados puros arbitrarios de N partículas indistinguibles basada en estados de M y $N-M$ partículas, es posible construir las matrices densidad generales de M cuerpos[1]. Se estudian estas matrices para un hamiltoniano de Pairing, general, en el que se examina si es posible recuperar al hamiltoniano a partir de las mismas, utilizando técnicas de Machine Learning (ML) basada en redes tipo convolucionales (CNN). Por otro lado, las ecuaciones de Bardeen–Cooper–Schrieffer (BCS) proveen una manera alternativa de reconstruir el hamiltoniano. Concluimos comparando esta reconstrucción con la dada por ML.

Referencias

- [1] Cianciulli, J. A., Rossignoli, R., Di Tullio, M., Gigena, N., & Petrovich, F. (2024). Bipartite representations and many-body entanglement of pure states of N indistinguishable particles. *Physical Review A*, 110(3), 032414. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.110.032414>

Comparación de funciones de estructura del protón a partir de Pomerones holográficos duales con resultados de funciones de distribución partónicas

J. CHAVES¹, M. SCHVELLINGER¹, D. JORRÍN²

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),*

Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina

² *Universidad Nacional de la Plata (UNLP), Universidad Nacional Arturo Jauretche (UNAJ), Universidad Católica Argentina (UCA)*

email: jchaves@iflp.unlp.edu.ar

La dispersión inelástica profunda (DIS) es un proceso físico que consiste en incidir un haz de leptones con un blanco de hadrones, intercambiando un fotón virtual de momento q , con la energía suficiente para probar la estructura del hadrón. De este proceso se obtienen las funciones de estructura del hadrón, que sólo dependen de las variables cinemáticas $Q^2 = -q^2$ y la variable de Bjorken $x = \frac{Q^2}{2p \cdot q}$ (p el momento del hadrón).

Las funciones de estructura se obtienen experimentalmente y es posible estudiarlas utilizando la dualidad AdS/CFT. De esta manera se obtiene el Pomerón BPST, que permite describir a la función de estructura $F_2(x, Q^2)$ [1]. En trabajos posteriores, se obtuvo el Pomerón holográfico A [2] que permite describir la función de estructura antisimétrica $g_1(x, Q^2)$ como también la función $F_3(x, Q^2)$ (ya que $2g_1(x, Q^2) = F_3(x, Q^2)$). Ambas funciones de estructura (F_2 y g_1) se utilizaron para ajustar datos experimentales [3, 4] obteniendo valores de χ^2 por grado de libertad cercanos a la unidad. Estos datos se encuentran en el rango electromagnético donde $Q^2 \leq 400 \text{ GeV}^2$.

En este trabajo, utilizamos el Pomerón BPST para ajustar datos experimentales de $F_2(x, Q^2)$ en el rango de $0,01 \leq x \leq 0,1$ y $Q^2 \leq 3000 \text{ GeV}^2$ donde los efectos electrodébiles son relevantes, obteniendo un $\chi^2 = 1,105$ para 282 datos experimentales provenientes de distintas colaboraciones, entre ellas H1-ZEUS [5] (los datos en el rango electrodébil provienen de esta colaboración). A su vez, se ajustó a la función $xF_3(x, Q^2)$ en el rango $0,01 \leq x \leq 0,1$ y $1000 \text{ GeV}^2 \leq Q^2 \leq 8000 \text{ GeV}^2$ obteniendo un $\chi^2 = 1,019$ para 24 datos experimentales [6] (este rango es puramente electrodébil). Cabe destacar que en ambos casos el ajuste es completo, en el sentido que se utilizaron todos los datos existentes de Q^2 para un dado valor de x [7].

Por último, comparamos la parametrización obtenida por los Pomerones holográficos con las funciones de estructura que se obtienen de forma perturbativa. Para eso, estudiamos a las funciones F_2 y xF_3 utilizando las PDFs (parton distribution functions). Éstas últimas se obtienen al estudiar ajustes globales de distintos experimentos y en nuestro caso se utilizó HERAPDF2.0 [6]. Para calcular las funciones de estructura, se utilizó la herramienta APFEL [8] (que calcula la evolución DGLAP de las PDFs) y la librería LHAPDF.

Referencias

- [1] R. C. Brower, J. Polchinski, M. J. Strassler and C. I. Tan, “The Pomeron and gauge/string duality,” JHEP **12** (2007), 005 doi:10.1088/1126-6708/2007/12/005 [arXiv:hep-th/0603115 [hep-th]].
- [2] N. Kovensky, G. Michalski and M. Schvellinger, “Deep inelastic scattering from polarized spin-1/2 hadrons at low x from string theory,” JHEP **10** (2018), 084 doi:10.1007/JHEP10(2018)084 [arXiv:1807.11540 [hep-th]].
- [3] D. Jorjin and M. Schvellinger, “Scope and limitations of a string theory dual description of the proton structure,” Phys. Rev. D **106**, no.6, 066024 (2022) doi:10.1103/PhysRevD.106.066024 [arXiv:2207.02984 [hep-ph]].
- [4] I. Borsa, D. Jorjin, R. Sassot and M. Schvellinger, “Proton helicity structure function g_1^p from a holographic Pomeron,” Phys. Rev. D **108**, no.5, 056024 (2023) doi:10.1103/PhysRevD.108.056024 [arXiv:2308.01975 [hep-ph]].
- [5] F. D. Aaron *et al.* [H1 and ZEUS], “Combined Measurement and QCD Analysis of the Inclusive e^+p Scattering Cross Sections at HERA,” JHEP **01**, 109 (2010) doi:10.1007/JHEP01(2010)109 [arXiv:0911.0884 [hep-ex]].
- [6] H. Abramowicz *et al.* [H1 and ZEUS], “Combination of measurements of inclusive deep inelastic $e^\pm p$ scattering cross sections and QCD analysis of HERA data,” Eur. Phys. J. C **75**, no.12, 580 (2015) doi:10.1140/epjc/s10052-015-3710-4 [arXiv:1506.06042 [hep-ex]].
- [7] J. Chaves, D. Jorrín, M. Schvellinger, “Electroweak effects on the proton structure from holographic Pomerons”, trabajo en preparación.
- [8] V. Bertone, “APFEL++: A new PDF evolution library in C++,” PoS **DIS2017**, 201 (2018) doi:10.22323/1.297.0201 [arXiv:1708.00911 [hep-ph]].

Resumen comparativo de metodologías para la predicción del estado preictal a partir de eeg

M. PALLARES DI NUNZIO¹, F. MONTANI^{1, 2}

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

email: monsepallaresdinunzio@fisica.unlp.edu.ar

En el contexto del estudio de la epilepsia refractaria, se comparan dos metodologías orientadas a la predicción del estado preictal a partir de registros de actividad cerebral. Ambas se fundamentan en el análisis de señales de electroencefalografía intracraneal (EEG_i), técnica que permite un registro de alta resolución temporal y espacial, clave para detectar patrones sutiles previos a una crisis epiléptica.

La primera metodología propone utilizar la *información mutua* (MI) como herramienta para cuantificar la transmisión de información entre diferentes ritmos neuronales en distintas etapas de la enfermedad: estado basal, preictal y postictal. Se parte del supuesto de que el acoplamiento entre frecuencias, reflejo de la interacción multiescala entre regiones corticales, presenta modificaciones significativas antes de una crisis. La MI, al capturar dependencias lineales y no lineales entre señales, se calcula entre distintas bandas de frecuencia para detectar variaciones que actúen como biomarcadores[1]. Esta información se emplea para entrenar un modelo de *Random Forest* capas de predecir el estado preictal con una precisión del 80 %, lo que representa un avance relevante en la detección temprana de crisis y la mejora en la calidad de vida de los pacientes.

La segunda metodología aborda la problemática desde un enfoque complementario, orientado a reducir el tiempo computacional requerido por el biomarcador propuesto y a mejorar la precisión en la predicción del estado preictal. Para ello, se construyen grafos de conectividad correspondientes a los tres estados analizados. Este enfoque se fundamenta en principios de plasticidad sináptica, bajo la hipótesis de que las variaciones en la sincronización local podrían reflejar procesos de adaptación o deterioro dentro de la red cerebral. Las medidas extraídas de dichos grafos son utilizadas como entrada para un modelo de *Random Forest*, que permite estimar la probabilidad de transición hacia el estado preictal. Si bien esta estrategia logró una precisión del 95 % [2, 3], se reconoce que puede presentar limitaciones en términos de sensibilidad, especialmente frente a cambios sutiles o no lineales.

En conjunto, ambas metodologías ofrecen aproximaciones complementarias: mientras la primera se centra en los flujos de información entre ritmos neuronales como posibles marcadores preictales, la segunda analiza la reorganización estructural y funcional de la red cortical desde una perspectiva de plasticidad. La combinación de ambas estrategias podría potenciar la precisión de los modelos predictivos y aportar una visión más integral de las dinámicas cerebrales que anteceden a una crisis epiléptica.

Referencias

- [1] Granado, M., Collavini, S., Martinez, N., Miceli, F., Rosso, O. A., & Montani, F. (2024). A multiscale symbolic approach to decoding delta and ripple oscillation bands as biomarkers for epileptiform discharges. **Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science**, 34(5), 053118. <https://doi.org/10.1063/5.0201354>
- [2] Pallares Di Nunzio, M., & Montani, F. (2022). Spike Timing-Dependent Plasticity with Enhanced Long-Term Depression Leads to an Increase of Statistical Complexity. *Entropy*, 24(10), 1384.
- [3] Pallares Di Nunzio, M., Martín Tenti, J., Arlego, M., Rosso, O. A., & Montani, F. (2024). Exploring the role of synaptic plasticity in the frequency-dependent complexity domain. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 35(2).

Cuantificadores de información aplicados a la evolución del COVID-19

G. GONZALEZ¹, A. M. KOWALSKI¹,

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Comisión de Investigaciones Científicas (CIC), La Plata, Argentina*

email: gaspar.gonzalez@fisica.unlp.edu.ar

En este artículo estudiamos la evolución de los contagios y muertes por COVID-19, desde marzo de 2020 hasta julio de 2024. Utilizamos la entropía de permutación de Shannon y la complejidad estadística de Jensen–Shannon, aplicadas a datos diarios de muertes e infectados de varios países. A fin de capturar los cambios locales en el tiempo, empleamos ventanas deslizantes, lo que nos permitió observar variaciones en la dinámica de la pandemia que no serían visibles en análisis globales. Las distribuciones de probabilidad obtuvimos mediante el método de Bandt y Pompe. Además, presentamos mapas de entropía y complejidad organizados por regiones, donde se evidencia que la propagación del virus no siguió una dinámica única, sino que presentó distintos niveles de organización e incertidumbre según el país y el momento. Finalmente, aplicamos escaleos a las series con el objetivo de hacer comparables los resultados entre países con distintas características.

Referencias

- [1] Bandt, C., & Pompe, B. (2002). Permutation entropy: a natural complexity measure for time series. *Physical review letters*, 88(17), 174102.
- [2] Pessa, A. A., & Ribeiro, H. V. (2021). ordpy: A Python package for data analysis with permutation entropy and ordinal network methods. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 31(6).
- [3] Kowalski, A. M., Martín, M. T., Plastino, A., & Rosso, O. A. (2007). Bandt–Pompe approach to the classical-quantum transition. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 233 (1), 21-31.

Identificación de biomarcadores topológicos preictales en epilepsia canina: un enfoque basado en patrones ordinales y mapas autoorganizados

M. GRANADO¹, N. MARTINEZ², F. MICELI¹, F. MONTANI¹,

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

² *Instituto de Investigaciones Físicas de Mar del Plata (IFIMAR), Universidad Nacional de Mar del Plata
(UNMDP),*

Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina

email: mgranado@iflp.unlp.edu.ar

En este trabajo se investiga la identificación de marcadores biométricos preictales en la epilepsia canina mediante el análisis multiescala de registros de EEG intracraneales. Para ello, se combina la metodología de Bandt-Pompe para la cuantificación de la entropía y la complejidad (plano $H \times C$) con la extracción de características topológicas a través de “Mapas Autoorganizados” (SOM) y la “Aproximación Uniforme de Múltiples Dimensiones” (UMAP). Si bien el análisis inicial de entropía-complejidad reveló dinámicas neuronales específicas de cada sujeto, no logró diferenciar de manera efectiva los estados epilépticos. Sin embargo, nuestra estrategia SOM-UMAP descubrió marcadores biométricos preictales distintivos a través de la reorganización de la red a escala mesoscópica con parámetros óptimos para el radio de vecindad (σ) y la tasa de aprendizaje (η) de los SOM.

Referencias

- [1] Granado, M., Collavini, S., Martinez, N., Miceli, F., Rosso, O. A., & Montani, F. (2024). A multiscale symbolic approach to decoding delta and ripple oscillation bands as biomarkers for epileptiform discharges. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 34(5), 053118. <https://doi.org/10.1063/5.0201354>
- [2] Granado, M., & Montani, F. (2025). Topological Biomarkers in Canine Epilepsy: Decoding Preictal States Through Ordinal Patterns and Self-Organizing Maps. *Entropy*, En revisión.
- [3] Kohonen, T. (1982). Self-organized formation of topologically correct feature maps. *Biological cybernetics*, 43(1), 59-69.
- [4] McInnes, L., Healy, J., & Melville, J. (2018). Umap: Uniform manifold approximation and projection for dimension reduction. *arXiv preprint arXiv:1802.03426*.
- [5] Zanin, M., Zunino, L., Rosso, O. A., & Papo, D. (2012). Permutation entropy and its main biomedical and econophysics applications: a review. *Entropy*, 14(8), 1553-1577.

Estudio teórico de la interacción superficial de nanoclústeres de óxidos de Fe en montmorillonita

V. L. DÍAZ DE ROSA^{1,2}, M. A. TAYLOR^{1,3}, R. E. ALONSO^{1,2,3}

¹ *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP),
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

² *Instituto de Ingeniería y Agronomía, Universidad Nacional Arturo Jauretche, Florencio Varela,
Argentina*

³ *Facultad de Ingeniería, UNLP, (1900) La Plata, Argentina*

email: v.diazderosa@iflp.unlp.edu.ar

El incremento de la contaminación ambiental ha impulsado el desarrollo de tecnologías de remediación que contribuyan a mitigar el impacto. Entre las más empleadas se encuentran aquellas basadas en procesos de adsorción. Entre los materiales más utilizados para este fin se encuentran las arcillas, como la montmorillonita (MMT), destacada por su alta superficie específica y capacidad de intercambio catiónico. Los estudios más recientes se centran en la funcionalización de estos materiales para mejorar su aplicabilidad, particularmente mediante la incorporación de propiedades magnéticas [1], lo que facilita su manipulación y recuperación, reduciendo además los riesgos para la salud humana y ambiental.

Como se informa en la literatura, los composites basados en montmorillonita y óxidos de hierro (Fe/MMT) han demostrado ser materiales prometedores para la remoción de contaminantes del agua. En particular, Barraqué et al. [2] informaron que estos composites presentan una buena capacidad de adsorción de iones metálicos como el Co^{2+} , y que su carácter magnético permite una separación eficiente mediante campos magnéticos externos, lo que representa una ventaja significativa en aplicaciones de remediación ambiental.

En este trabajo se presenta un estudio teórico de adsorción de nanoclústeres con estequiometría de magnetita (Fe_3O_4) y maghemita (Fe_2O_3) sobre Na-MMT, mediante cálculos de primeros principios en el marco de la Teoría del Funcional Densidad (DFT). A partir de la estructura prístina de la Na-MMT, se construyeron superceldas con 25 Å de vacío y tres orientaciones cristalográficas (001, 100 y 010). El análisis de energía de formación determinó que la superficie (001) es la más estable. En particular, se evaluaron cuatro sitios de adsorción (Si, O basal, OH y Mg), acercando los nanoclústeres progresivamente desde una distancia de 8 Å, en pasos de 2 Å, permitiendo la relajación tanto superficial como del nanoclúster en cada etapa. Los resultados energéticos indican que en ambos casos, un átomo de Fe se enlaza a un oxígeno basal de la superficie.

Referencias

- [1] C. Deng, J. Zhao, C.-L. Deng, Q. Lv, L. Chen, Y.-Z. Wang, Effect of two types of iron MMTs on the flame retardation of LDPE composite. *Polymer Degradation and Stability*, 103, 1–10, 2014. <https://doi.org/10.1016/j.polymdegradstab.2014.03.001>

- [2] F. Barraqué, M. L. Montes, M. A. Fernández, R. C. Mercader, R. J. Candal, R. M. Torres Sánchez, Synthesis and characterization of magnetic-montmorillonite and magnetic-organo-montmorillonite: Surface sites involved on cobalt sorption. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 466, 376–384, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2018.07.052>