

**Maestría en Ciencias Físicas**  
**Instituto Balseiro**

Propuestas de tesis – Ciclo 2017–2018

# Índice

## -Física en Medicina y Biología

- 1. Estudio de interacción dipolar entre nanopartículas en hipertermia.** Emilio De Biasi (debiasiem@gmail.com)
- 2. Proceso de calentamiento de nanopartículas magnéticas con campos magnéticos AC (Hipertermia magnética): experimentos in vitro.** Roberto D. Zysler (zysler@cab.cnea.gov.ar)
- 3. Mejorando la resolución de imágenes por resonancia magnética nuclear para estudiar microestructuras en tejidos y órganos.** Gonzalo A. Alvarez (gonzalo.alvarez@cab.cnea.gov.ar)
- 4. Análisis de registros cerebrales en un marco de investigación traslacional en epilepsia.** Germán Mato (matog@cab.cnea.gov.ar)
- 5. Comunicación neuronal mediante acoplamiento entre frecuencias.** Eugenio Urdapilleta (urdapile@gmail.com)
- 6. Procesamiento no-lineal en fotorreceptores.** Eugenio Urdapilleta (urdapile@gmail.com)
- 7. Integración funcional de neuronas generadas en el adulto mediante técnica de Imaging de Ca<sup>2+</sup> empleando Microscopía a Dos Fotones.** Lucas A Mongiat (lmongiat@comahue-conicet.gob.ar)
- 8. Desarrollo e implementación de dispositivos y software para monitorear y caracterizar la actividad locomotora de la mosca de la fruta *Drosophila Melanogaster*.** Lorena Franco (lorefranco@gmail.com)
- 9. Determinación de Propiedades Eléctricas de Células de Mamíferos utilizando Arreglos de MicroElectrodos de tamaño celular.** Fabián Bonetto (bonetto@cab.cnea.gov.ar)

## -Física Tecnológica

- 10. Aplicaciones de óptica no lineal.** Diego Grosz (grosz@ib.edu.ar)
- 11. Dispersión aerodinámica de polvos cohesivos.** Nicolás Silin (silin@cab.cnea.gov.ar)
- 12. Desarrollo y automatización de un magnetómetro de gradiente de campo alterno.** Alejandro Butera (butera@cab.cnea.gov.ar)

**13. Antenas ópticas multiescala para la detección óptica ultrasensible de moléculas.** Alejandro Fainstein (alex.fainstein@gmail.com)

**14. Fabricación y caracterización eléctrica de juntas superconductor/aislante/superconductor.** Nestor Haberkorn (nhaberk@cab.cnea.gov.ar)

**15. Caracterización, diseño y fabricación de una celda de combustible de óxido sólido portátil de pequeña escala.** Laura Baqué (baquel@cab.cnea.gov.ar)

**16. Dinámica de fluidos no newtonianos en dispositivos de microfluidica.** Hernan Pastoriza (hpastoriza@gmail.com)

**17. Desarrollo de simulador de propulsor de efecto Hall.** José M Relloso (relloso@invap.com.ar)

### -Sistemas Complejos

**18. Evolución biológica en el origen de la vida: Transmisión de genes horizontal versus vertical.** Sebastián Bouzat (bouzat@cab.cnea.gov.ar)

**19. La ecuación de Hamilton-Jacobi y los sistemas mecánicos forzados.** Sergio Grillo (sergrill@gmail.com)

### -Partículas y Campos

**20. Aspectos de Información Cuántica en Teoría de Campos.** Gonzalo Torroba (torrobag@gmail.com)

**21. Algunos aspectos del efecto Casimir dinámico .** Francisco Diego Mazzitelli (fdmazzi@cab.cnea.gov.ar)

**22. Determinación de la escala de energía del Observatorio Pierre Auger con detectores de centelleo.** Xavier Bertou (bertou@cab.cnea.gov.ar)

**23. Teorías de gravedad modificada y su relación con el problema de la energía gravitatoria.** Franco Fiorini (francof@cab.cnea.gov.ar)

**24. Compactificaciones en Teoría de Cuerdas, Teoría Doble de Campos y fenomenología.** Gerardo Aldazabal (aldazaba@cab.cnea.gov.ar)

### -Ciencia de Materiales

**25. Simulación de los procesos de Interacción entre moléculas y superficies de SiO<sub>2</sub>.** Matias Nuñez (matias.nunez@gmail.com)

**26. Informática de materiales y estructura electrónica.** . Matias Nuñez (matias.nunez2@gmail.com)

**27. Metrología de radiaciones ionizantes con Resonancia Paramagnética Electrónica.** Alejandro Butera (butera@cab.cnea.gov.ar)

**28. Fabricación y caracterización de esponjas de Cu-Ni-Al por métodos de pulvimetalurgia.** Maria Teresa Malachevsky (malache@cab.cnea.gov.ar)

**29. Diseño de nuevos materiales y su respuesta como sensores de gases y compuestos volátiles.** Martín Eduardo Saleta (martin.saleta@cab.cnea.gov.ar)

**30. Nanopartículas bimagnéticas con estructura core/shell: fabricación, propiedades magnéticas y magnetotransporte.** Elin Winkler (winkler@cab.cnea.gov.ar)

**31. Almacenamiento de hidrógeno en materiales base Mg: efecto de aditivos en fase líquida.** Guillermina Urretavizcaya (urreta@cab.cnea.gov.ar)

**32. Microscopía electrónica de alta resolución aplicada al estudio del endurecimiento por precipitación en aleaciones de aluminio.** Alfredo Tolley (tolley@cab.cnea.gov.ar)

**33. Crecimiento y caracterización de heteroestructuras semiconductoras de AlGaAs por MBE.** Hernan Pastoriza (hpastoriza@gmail.com)

**34. Sintonización de propiedades ópticas en dispositivos fotónicos mediante la utilización de grafeno.** Julián Milano (milano@cab.cnea.gov.ar)

**35. Interacción magnética en películas delgadas estudiada a través de reflectometría polarizada de neutrones.** Julián Milano (milano@cab.cnea.gov.ar)

**36. Aplicaciones de propiedades plasmónicas a la detección molecular mediante resonancia de plasmones superficiales (SPR).** María Laura Pedano (ml.pedano@cab.cnea.gov.ar)

**37. Nanoestructuras plasmónicas: Aplicaciones a la detección molecular por SERS.** María Laura Pedano (ml.pedano@cab.cnea.gov.ar)

## -Interacción de la Radiación con la Materia

**38. Soluciones exactas del problema de tres cuerpos cuántico: estructura y ionización de sistemas confinados.** Juan Martín Randazzo (randazzo@cab.cnea.gov.ar)

**39. Interferencias cuánticas en la emisión electrónica coherente desde moléculas diatómicas.** Sergio Suárez (suarez@cab.cnea.gov.ar)

**40. Coherencia y contextualidad en procesos de colisión.** Raúl Barrachina (barra@cab.cnea.gov.ar)

**41. Descripción de procesos de colisión en el marco de la teoría de trayectorias cuánticas.** Raúl Barrachina (barra@cab.cnea.gov.ar)

**42. Estudio de la sección eficaz neutrónica del calcio.** Javier Dawidowski (javier@cab.cnea.gov.ar)

**43. Dinámica de partículas supratérmicas en plasmas de fusión.** Ricardo Farengo (farengo@cab.cnea.gov.ar)

**44. Pérdida de energía de  $H^+$ ,  $D^+$  y  $He^+$  en blancos sólidos.** Esteban Cantero (canteroe@cab.cnea.gov.ar)

**45. Excitación de plasmones en laminas de grafeno.** Silvina Segui (segui@cab.cnea.gov.ar)

**46. Equilibrio magnetohidrodinámico, inestabilidades y difusión magnética en plasmas de fusión nuclear.** Pablo García Martínez (pablogm@cab.cnea.gov.ar)

**47. Vórtices cuánticos en procesos de ionización.** Francisco Oscar Navarrete (navarrete@cab.cnea.gov.ar)

**48. Tolerancia a la radiación en láminas delgadas de nitruros metálicos.** Sergio Suárez (suarez@cab.cnea.gov.ar)

**49. Preparación y Estudio de Nuevas Redes Metal-Orgánico Confinadas en Superficies.** Hugo Ascolani (ascolani@cab.cnea.gov.ar)

**50. Adsorción de moléculas orgánicas en superficies.** Esteban A. Sánchez (esanchez@cab.cnea.gov.ar)

**51. Germaneno: un nuevo material 2-D similar al grafeno y al siliceno.** Oscar Grizzi (grizzi@cab.cnea.gov.ar)

## -Materia Condensada

**52. Orden magnético y efectos de interacciones en la interfaz de fases magnéticas diferentes en nanopartículas bimagnéticas magnetita/hematita con estructura 'core-shell'.** Roberto D. Zysler (zysler@cab.cnea.gov.ar)

- 53. Nonlinealidades y efectos cuánticos en dispositivos optomecánicos semiconductores.** Alejandro Fainstein (alex.fainstein@gmail.com)
- 54. Simulaciones cuánticas: Monitoreo de sistemas cuánticos de muchos cuerpos fuera de equilibrio.** Gonzalo A. Alvarez (gonzalo.alvarez@cab.cnea.gov.ar)
- 55. Optimizando sensores cuánticos por resonancia magnética nuclear para caracterizar procesos físicos, químicos, biológicos y de interés en medicina.** Gonzalo A. Alvarez (gonzalo.alvarez@cab.cnea.gov.ar)
- 56. Propiedades electrónicas del semi-metal  $WTe_2$ .** Víctor Félix Correa (victor.correa@cab.cnea.gov.ar)
- 57. Diseño y caracterización de láseres de cascada cuántica en el infrarrojo medio.** Guillermo Rozas (grozas@cab.cnea.gov.ar)
- 58. Acoplamiento entre un gas de electrones bidimensional y una red de vórtices en movimiento.** César R. Proetto (proetto@cab.cnea.gov.ar)
- 59. Orden orbital y magnético en  $Sr_2CrO_4$ .** Pablo S. Cornaglia (pablo.cornaglia@cab.cnea.gov.ar)
- 60. Superredes de calcogenuros superconductores.** Julio Guimpel (jguimpel@cab.cnea.gov.ar)
- 61. Nanoestructuras superconductoras con desorden.** Julio Guimpel (jguimpel@cab.cnea.gov.ar)
- 62. Física Estadística de paredes de dominio magnéticas.** Sebastian Bustingorry (sbusting@cab.cnea.gov.ar)
- 63. Sensores de fotones superconductores MKIDs para futuros mapeos de la estructura de gran escala en el Universo.** Mariano Gomez Berisso (berisso@cab.cnea.gov.ar)
- 64. Propiedades magnéticas y de transporte de calcogenuros de metales de transición superconductores .** Gladys Nieva (gnieva@cab.cnea.gov.ar)
- 65. Dinámica ultra-rápida de excitaciones elementales en pozos cuánticos semiconductores.** Axel Bruchhausen (axel.bruchhausen@cab.cnea.gov.ar)
- 66. Dispositivos de estado sólido para computación cuántica.** Daniel Dominguez (domingd@cab.cnea.gov.ar)
- 67. Efectos multibanda en propiedades electrónicas (conductividad óptica, transporte y efecto Hall) de nuevos superconductores basados en Fe o Bi.** Cecilia I. Ventura (ventura@cab.cnea.gov.ar)

**68. Efectos de dopaje y temperatura sobre las propiedades electrónicas de superconductores basados en Fe.** Cecilia I. Ventura (ventura@cab.cnea.gov.ar)

## 1. Estudio de interacción dipolar entre nanopartículas en hipertermia.

**Director:** Emilio De Biasi (debiasiem@gmail.com)

**Lugar de trabajo:** Laboratorio de Resonancias Magnéticas, Centro Atómico Bariloche. – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Física en Medicina y Biología – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Computacional – **Metodología secundaria:** Experimental

### **Descripción:**

Perfil de trabajo propuesto: Principalmente teórico-computacional (planteo de modelo y simulaciones) aunque se estima que el estudiante pueda participar activamente en experimentos estrechamente vinculados a la temática planteada.

Plan de trabajo:

En el presente plan de trabajo se propone estudiar el efecto de la interacción dipolar entre nanopartículas simulando las condiciones que tienen lugar en las células, en tratamientos de hipertermia. Hipertermia es una técnica experimental que está siendo intensivamente desarrollada y estudiada con el objetivo de sobrecalentar (matando) células cancerígenas. Las nanopartículas, que se alojan en las células, son sometidas a la acción de un campo magnético alterno (de aproximadamente 100 Oe de amplitud y 100 kHz de frecuencia) y a través de diferentes mecanismos de relajación magnética, disipan localmente parte de la energía entregada. El estudio de estos mecanismos resulta fundamental en esta técnica, de modo de conseguir optimizar los parámetros requeridos en las nanopartículas para lograr una mayor disipación de energía con menor cantidad de partículas, a fin de hacer la técnica lo menos invasiva posible y mejorar su implementación. En este sentido, las interacciones entre partículas son de determinante importancia, puesto que se observa que las partículas se aglomeran en las células. Dicha aglomeración hace que el radio hidrodinámico efectivo de las nanopartículas se incremente notablemente, haciendo muy difícil el movimiento de las mismas en el líquido. Bajo estas condiciones, la relajación magnética de las partículas se vuelve compleja, no sólo porque se estudia a frecuencias del orden de 100 kHz, sino también por el efecto de la interacción dipolar, que, en determinadas condiciones experimentales, incrementa la histéresis del sistema a estas frecuencias de trabajo. Este problema no tiene una solución analítica cerrada y debe ser abordado a través de simulaciones numéricas. Por otra parte, se planea, en paralelo con el trabajo teórico-numérico, simular las condiciones de agregación de las partículas experimentalmente utilizando diferentes medios líquidos viscosos (como podría ser clara de huevo, por ejemplo). Variando la concentración de partículas se podrá estudiar el efecto de interacciones y obte-

ner un feedback adecuado con el tratamiento teórico. El trabajo planteado en esta propuesta considera también la participación del interesado en esta fase experimental, con un grado de participación variable de acuerdo a las preferencias del candidato y la situación eventual del trabajo. Para la implementación de los cálculos se aprovecharán las facilidades computacionales del laboratorio como también el clusters de procesadores que disponemos en el CAB.

## **2. Proceso de calentamiento de nanopartículas magnéticas con campos magnéticos AC (Hipertermia magnética): experimentos in vitro**

**Director:** Roberto D. Zysler (zysler@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Laboratorio Resonancias Magnéticas – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Física en Medicina y Biología – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** La hipertermia está aceptada como alternativa de tratamiento para el cáncer basado en el aumento de la temperatura en la región tumoral. El tratamiento con nanopartículas magnéticas es una opción nueva, mínimamente invasiva, que permitiría obtener este calentamiento localizado. En esta técnica se inyecta un fluido que contiene nanopartículas superparamagnéticas biocompatibles que son luego selectivamente calentadas en un campo magnético alterno [1]. Si las partículas se ubican o van dirigidos hacia sitios específicos el calentamiento será local y selectivo. En nuestro laboratorio hemos realizado investigaciones previas sobre los mecanismos involucrados en el proceso de calentamiento de estas partículas determinados por los mecanismos de relajación de los momentos magnéticos, dominados por la relajación del momento superparamagnético del la nanopartícula y los mecanismos de rotación de la partícula en el medio [2-4]. Hoy, el estado-del-arte en la investigación en hipertermia de fluido magnético busca comprender los resultados de experimentos in vitro e in vivo. Se conoce claramente que en este tipo de experimentos la respuesta magnética de las nanopartículas a un campo magnético alterno no es la misma que la observada en un ferrofluido, por efectos diversos como la presencia de interacciones magnéticas entre las partículas, aglomeración, cambio de viscosidad en el medio celular, etc. Además, en los estudios in vitro, son puntos clave la absorción de las nanopartículas (CELL UPTAKE), la localización de las partículas en el medio intracelular y la toxicidad de las mismas. En esta tesis proponemos la investigación in vitro del calentamiento de nanopartículas de magnetita ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ) dentro del rango 8 -20 nm de diámetro sintetizadas en nuestro laboratorio al ser excitadas por un campo magnético alterno ( $\sim 100\text{kHz}$ , 200 Oe). Las partículas se encontrarán en cultivos de levaduras. El fin de este trabajo será determinar la posibilidad de inducir la muerte celular de estos sistemas por hipertermia, pero sin el sobrecalentamiento de las células (over heating); o sea, con temperatura del medio siempre inferiores a  $45^\circ\text{C}$ , y analizar de los mecanismos de calentamiento involucrados.

Notas: 1. Se propone codirector dado que el Dr, Enio Lima cumplirá el rol de dirigir la síntesis y funcionalización de la superficie de las nanopartículas. También participará en conjuntamente en experimentos de hipertermia

2. Los crecimientos de los cultivos se realizarán en el Instituto de Energía y Desarrollo Sustentable (IEDS), CAB.

Referencias:

[1] Q A Pankhurst, J Connolly, S K Jones<sup>3</sup> and J Dobson. Applications of magnetic nanoparticles in biomedicine, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 36 R167-R181, (2003).

[2] Enio Lima Jr., Emilio De Biasi, Roberto D. Zysler, Marcelo Vasquez Mansilla, Mary L. Mojica-Pisciotti, Teobaldo E. Torres, M. Pilar Calatayud, C. Marquina, M. Ricardo Ibarra, Gerardo F. Goya, Relaxation time diagram for identifying heat generation mechanisms in magnetic fluid hyperthermia, *J Nanopart Res* 16, 2791 (11pages) (2014).

[3] Beatriz Sanz, M. Pilar Calatayud, Emilio De Biasi, Enio Lima Jr., Marcelo Vasquez Mansilla, Roberto D. Zysler, M. Ricardo Ibarra and Gerardo F. Goya, In Silico before In Vivo: how to Predict the Heating Efficiency of Magnetic Nanoparticles within the Intracellular Space, *Scientific Reports* 6, 38733 (2016).

[4] Mary Luz Mojica Pisciotti, Roberto Zysler, Nanopartículas magnéticas para tratamiento de tumores por hipertermia. Propiedades magnéticas, estudio del calentamiento y método de cuantificación, Editorial Academica Española, LAP Lambert Academic Publishing GmbH

### 3. Mejorando la resolución de imágenes por resonancia magnética nuclear para estudiar microestructuras en tejidos y órganos

**Director:** Gonzalo A. Alvarez (gonzalo.alvarez@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Laboratorio de Espectroscopia e Imágenes por Resonancia Magnética Nuclear - Departamento de Física Médica - Centro Atómico Bariloche  
– **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Física en Medicina y Biología – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Teórico – **Metodología secundaria:** Experimental

#### **Descripción:**

Aclaración: Según tu interés y vocación, este trabajo se puede desarrollar en un marco teórico y/o experimental!

La resonancia magnética nuclear es una poderosa herramienta para investigar estructuras de sistemas químicos y biológicos. Combinada con gradientes de campo magnético a dado lugar a la técnica de imágenes por resonancia magnética nuclear (MRI), una herramienta muy utilizada en exámenes médicos no invasivos. La sensibilidad de detección de espines nucleares, limita la resolución espacial de las imágenes a decenas de micrómetros en estudios preclínicos y a milímetros en estudios clínicos. Sin embargo, otras fuentes de información como las suministradas por procesos de difusión molecular restringida permiten extraer información morfológica llegando hasta escalas micrométricas y sub-micrométricas. Hemos desarrollado métodos que explotan la difusión, tanto isotrópica como anisotrópica, para detectar parámetros morfológicos en el rango de nm-mm [1-7]. Estos métodos por un lado explotan distribuciones de gradientes de campo magnético inducidos por cambios en la susceptibilidad magnética [3,5] y por otro, interferencias cuánticas generadas por reversiones en el tiempo inducidas con técnicas de MRI [1,2,8,9]. Estos métodos nos han permitido mejorar sustancialmente la sensibilidad para determinar tamaños de las cavidades donde ocurre la difusión molecular [1,2,4,6,7]. Esto nos permitió generar nuevos contrastes en imágenes basados en parámetros que definen distribuciones de tamaños poros y fibras en tejidos [4] y en parámetros que definen geometrías de las cavidades [5] (e.j. orientaciones de fibras).

Esperamos que eventualmente estos métodos deriven en nuevas aplicaciones para el diagnóstico de enfermedades. Hasta el día de hoy, estos métodos han sido solo implementados en equipos preclínicos, por lo que el objetivo de esta tesis es abrir el camino para aplicarlos en estudios de rutina en equipos clínicos. Para ello, se adaptarán y optimizarán los estos métodos para utilizarlos en equipos de MRI clínicos. Se evaluará cual es el rango de estructuras de interés médico que pueden determinarse con estos métodos en equipos clínicos, y eventualmen-

te se utilizará esta información para desarrollar nuevos métodos para estudiar microestructuras de tejidos y órganos con fines específicos.

- 1 G. Alvarez, N. Shemesh, and L. Frydman, *Phys. Rev. Lett.* 111, 080404 (2013).
- 2 N. Shemesh, G. A. Alvarez, and L. Frydman, *J. Magn. Reson.* 237, 49 (2013).
- 3 G. A. Alvarez, N. Shemesh, and L. Frydman, *J. Chem. Phys.* 140, 084205 (2014).
- 4 N. Shemesh, G. A. Alvarez, and L. Frydman, *PLoS ONE* 10, e0133201 (2015).
- 5 G.A. Alvarez, N. Shemesh, and L. Frydman. En referato en *Nature Sci. Rep.* (2017). 'Internal gradient distributions: A susceptibility-derived tensor delivering morphologies by magnetic resonance'
- 6 A. Zwick, G. A. Alvarez, and G. Kurizki, *Phys. Rev. Applied* 5, 014007 (2016).
- 7 A. Zwick, G.A. Alvarez, and Gershon Kurizki. *Phys. Rev. A* 94, 042122 (2016).
- 8 G. A. Alvarez and D. Suter, *Phys. Rev. Lett.* 104, 230403 (2010).
- 9 D. Suter and G.A. Alvarez. *Rev. Mod. Phys.* 88, 041001 (2016).

## 4. Análisis de registros cerebrales en un marco de investigación traslacional en epilepsia

**Director:** Germán Mato (matog@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Departamento de Física Médica – **Lugar de trabajo alternativo:** Laboratorio de Bajas Temperaturas

**Orientación:** Física en Medicina y Biología – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Computacional – **Metodología secundaria:** Experimental

### Descripción:

Objetivo general

La presente propuesta está orientada al análisis de registros cerebrales en humanos. El objetivo más general se refiere a la utilización de herramientas de modelado de redes neuronales y procesamiento de señales para el abordaje de aspectos relevantes desde el punto de vista clínico: 1) Determinación del tiempo de inicio de la actividad ictal (crisis epiléptica). 2) Determinación de la ubicación espacial del grupo de neuronas que desencadena la crisis (foco epileptógeno). 3) Aportar información que permita avanzar en la comprensión de los procesos neuronales subyacentes a la crisis epiléptica (epileptogénesis).

### Introducción

La epilepsia es un desorden neurológico vinculado a trastornos motores y de la conciencia que afecta al 1 % de la población mundial. En Argentina, se estima que la epilepsia afecta a 1 de cada 200 habitantes.

Las crisis se han redefinido como generalizadas o focales dependiendo de si ocurren y afectan rápidamente a redes distribuidas bilateralmente (crisis generalizadas) o en redes limitadas a un hemisferio cerebral bien localizadas o más ampliamente distribuidas (focales) [1].

A nivel neuronal, una crisis de epilepsia focal se encuentra caracterizada por la sincronización exagerada de las descargas sinápticas de un grupo reducido de neuronas (por ejemplo, algunas decenas de neuronas ubicadas en el giro recto del hipocampo). Esta actividad neuronal sincronizada es capaz de reclutar otros grupos de neuronas propagándose así hacia otras regiones cerebrales (por ejemplo, la corteza motora).

Más del 90 % de los casos de epilepsia generalizada no requieren de procedimientos quirúrgicos ya que responden adecuadamente a la medicación [2].

Por otra parte, el 30 % de los pacientes con diagnóstico de epilepsia poseen algún

tipo de epilepsia focal que resulta refractaria a la medicación. En consecuencia, el tratamiento alternativo para estos pacientes consiste en un procedimiento quirúrgico destinado a la ablación del foco epileptógeno.

La implementación exitosa de este procedimiento quirúrgico se basa en el grado de exactitud con que se determina la ubicación espacial del foco epileptógeno. Esto último se consigue mediante la implantación de electrodos para el registro de la actividad cerebral eléctrica (SEEG: Stereo intracerebral- ElectroEncephaloGraphy). A partir de estos registros es posible obtener información vinculada al inicio de la actividad ictal y la ubicación del foco epileptógeno.

Es importante notar que estas técnicas invasivas (SEEG), desinadas a la identificación del foco epileptógeno, ofrecen en forma secundaria un escenario único para el estudio tanto de la epileptogénesis como así también de la fisiología (propiedades y funcionamiento en estado no patológico) de distintos núcleos neuronales del cerebro humano.

#### Antecedentes

En el marco de la colaboración con el Grupo de Neurociencia del Hospital El Cruce Nestor Carlos Kirchner, Florencia Varela, Buenos Aires [2], se han identificado problemas abiertos en epilepsia focal que resultan clínicamente relevantes: 1) Determinación del tiempo de inicio de la actividad ictal (crisis epiléptica). 2) Determinación de la ubicación espacial del grupo de neuronas que desencadena la crisis (foco epileptógeno). 3) Aportar información que permita avanzar en la comprensión de los procesos neuronales subyacentes a la crisis epiléptica (epileptogénesis).

Desde 2015 hemos realizado análisis de los registros cerebrales (SEEG) obtenidos en pacientes con epilepsia focal mediante algoritmos para la detección de acoplamientos inter-frecuencia.

#### Actividades y Metodología

1) Se analizarán sistemáticamente registros de varias crisis epilépticas en varios pacientes a fin de determinar que rasgos de los registros son reproducibles y cuales no. 2) Para los rasgos reproducibles en cada paciente se procederá a la caracterización de sus propiedades estadísticas (por ejemplo relación señal-ruido) 3) Se propondrán modelos simples que permitan estimar el tiempo de inicio de la crisis y el error de la estimación en al menos un electrodo 4) Si hay información confiable para varios electrodos se combinará la información para estimar la posición del foco epileptogénico 5) Opcionalmente, si hay tiempo disponible se analizarán también datos inter-ictales (es decir entre la crisis) para refinar la eficacia de la localización

#### Factibilidad

La factibilidad de la realización de la propuesta es soportada por la disponibilidad de los registros cerebrales obtenidos en pacientes con epilepsia focal refractaria [2] además de la experiencia del director y co-director propuestos en cuanto al modelado de redes neuronales y procesamiento de registros.

#### Referencias

[1] International League Against Epilepsy. <http://www.ilae.org/Commission/Class/documents/Spanish-Berg2010.pdf>

[2] Comunicación interna. Dra. Silvia Kochen.

[http://www.ibcn.fmed.uba.ar/kochen\\_lab\\_cv/Silvia\\_Kochen\\_CV\\_esp.pdf](http://www.ibcn.fmed.uba.ar/kochen_lab_cv/Silvia_Kochen_CV_esp.pdf)

[http://www.ibcn.fmed.uba.ar/200\\_grupos-lab-epilepsia-kochen-en.html](http://www.ibcn.fmed.uba.ar/200_grupos-lab-epilepsia-kochen-en.html)

<http://www.hospitalelcruce.org/index.php/servicios/81-servicios/2570-neurociencias-y-neurocirugia>

## 5. Comunicación neuronal mediante acoplamiento entre frecuencias

**Director:** Eugenio Urdapilleta (urdapile@gmail.com)

**Lugar de trabajo:** Grupo de Física Estadística e Interdisciplinaria – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Física en Medicina y Biología – **Orientación alternativa:** Sistemas Complejos

**Metodología principal:** Teórico – **Metodología secundaria:** Computacional

**Descripción:** En distintas regiones del cerebro, a nivel local, grupos de neuronas que disparan exhiben un comportamiento colectivo coherente que da lugar a ritmos. En base a su contenido espectral, estos ritmos típicamente se clasifican de acuerdo a su ancho de banda y suelen asociarse a distintos comportamientos y/o demandas cognitivas. Más aún, existe evidencia experimental de que parte de la comunicación neuronal entre regiones distantes se basa en la coherencia de distintos ritmos. En este trabajo se analizarán modelos detallados de generación de ritmos lentos, típicamente en el rango theta, embebidos en comportamientos colectivos de acoplamiento entre frecuencias. Dado que la descripción minimalista del fenómeno de acoplamiento entre frecuencias se basa en un modelo de dos poblaciones con una excitación externa lenta, en este trabajo buscaremos incorporar las características de un circuito microscópico detallado que produce un ritmo lento dentro del esquema de dos poblaciones que exhibe el efecto de acoplamiento. Posteriormente, se analizarán y cuantificarán las características resultantes de la comunicación entre regiones. Por otro lado y en forma complementaria, se evaluará el efecto de acoplamiento entre frecuencias en mediciones de distintos orígenes: 1) oscilaciones en corteza entorhinal + hipocampo en experimentos con roedores, 2) oscilaciones en pacientes implantados, en condiciones normales y durante crisis epilépticas, en distintas regiones cerebrales. Se analizará el origen del acoplamiento y su fundamento fisiológico en base a los modelos desarrollados en la primer etapa.

## 6. Procesamiento no-lineal en fotorreceptores

**Director:** Eugenio Urdapilleta (urdapile@gmail.com)

**Lugar de trabajo:** Grupo de Física Estadística e Interdisciplinaria – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Física en Medicina y Biología – **Orientación alternativa:** Sistemas Complejos

**Metodología principal:** Computacional – **Metodología secundaria:** Teórico

**Descripción:** La representación de los estímulos visuales en el cerebro comienza por el procesamiento en la retina y, en particular, por la recepción y transducción de fotones en los fotorreceptores. Las etapas que se suceden desde la interacción de los fotones con el pigmento sensible a la luz, rhodopsina u opsina, hasta la descripción de la excitabilidad eléctrica en la primera capa neuronal, compuesta por células bipolares, se conoce con gran detalle, aunque todavía existen algunas controversias. En este trabajo utilizaremos un modelo detallado del procesamiento de estímulos visuales del sistema acoplado compuesto de fotorreceptores y células horizontales, con particular énfasis en el tipo de realimentación necesaria (donde existen controversias) para generar el enorme rango dinámico que presenta el sistema visual y los fotorreceptores en particular, con el objeto de investigar las características no-lineales del procesamiento temporal en distintos regímenes de luminosidad. Trabajaremos al nivel de sistemas aislados, donde sólo un fotorreceptor está presente y la realimentación se asume de campo medio, y sistemas extensos heterogéneos donde la realimentación se nutre de la presencia de distintos fotorreceptores. En todos los casos, con el modelo detallado construiremos una descripción simplificada en base a una expansión funcional de Wiener (estímulos Gaussianos) y de Volterra (estímulos con una estadística arbitraria), la cual tiene una interpretación computacional más intuitiva.

## 7. Integración funcional de neuronas generadas en el adulto mediante técnica de Imaging de Ca<sup>2+</sup> empleando Microscopía a Dos Fotones

**Director:** Lucas Mongiat (lmongiat@comahue-conicet.gob.ar)

**Lugar de trabajo:** Departamento de Física Medica (Gerencia de Física) –

**Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Física en Medicina y Biología – **Orientación alternativa:**

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** Computacional

**Descripción:** En la última década la investigación biomédica ha avanzado enormemente en el estudio y uso de células madre con fines terapéuticos. Sin embargo, nuestro cerebro es un órgano altamente complejo compuesto por miles de millones de neuronas altamente interconectadas conformando complejos circuitos neuronales. Esta línea de investigación explora las capacidades naturales de regeneración del sistema nervioso central (SNC) que poseen los peces. A diferencia de los mamíferos, estos vertebrados poseen a lo largo de su sistema nervioso una elevada abundancia de células madre neurales inmersas en un entorno celular y molecular que favorece procesos regenerativos altamente eficientes en su SNC. El trabajo aquí propuesto explorará el curso temporal de la integración funcional de las neuronas generadas en el cerebro adulto del pez cebra. Para esto haremos uso de un sistema de microscopía a dos fotones. El desarrollo de sistemas de óptica ha fortalecido de manera significativa la investigación en áreas biomédicas. Un claro ejemplo es la microscopía a dos fotones [1], técnica que permite la adquisición de imágenes en 3 dimensiones en especímenes biológicos in vivo. Este desarrollo, ofrece la ventaja de la penetración en profundidad dentro del tejido biológico con una resolución espacial submicrométrica y reduce el fotodaño [2]. Este proyecto propone que el alumno: a) Comprenda las bases del funcionamiento y participar en el armado y puesta a punto de un microscopio a dos fotones, el cual está en este momento siendo ensamblado en el Laboratorio de Fotónica y Optoelectrónica del CAB. b) Emplee esta técnica para estudiar el curso temporal de la incorporación funcional de neuronas generadas en el cerebro adulto, mediante el estudio de señales de Calcio evocadas por estimulación eléctrica de regiones cerebrales en un modelo animal [3].

Estudiar la dinámica temporal de la integración funcional de nuevas neuronas en circuitos preexistentes resulta de gran relevancia para el futuro desarrollo de terapias regenerativas del sistema nervioso. Referencias: [1] Denk W. et al. (1990) Science, 248, 73-76. [2] Svoboda, K. et al. (1997) Nature 385, 161. [3] Marin-Burgin A.\*, Mongiat\* L. et al. (2012) Science, 355, 1238-42.

## 8. Desarrollo e implementación de dispositivos y software para monitorear y caracterizar la actividad locomotora de la mosca de la fruta *Drosophila Melanogaster*

**Director:** Lorena Franco (lorefranco@gmail.com)

**Lugar de trabajo:** Departamento de Física Medica (Gerencia de Física) –

**Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Física en Medicina y Biología – **Orientación alternativa:**

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** Computacional

**Descripción:** La mayoría de los organismos, incluidos los humanos, son capaces de coordinar sus funciones fisiológicas y comportamiento a ciclos diarios generados por la rotación y traslación de la Tierra. Estos ritmos biológicos son sincronizados por la luz y la temperatura y persisten aún en oscuridad, lo cual pone de manifiesto la existencia de mecanismos internos (relojes moleculares) capaces de generar estos ciclos. Los relojes moleculares regulan la conducta circadiana. Algunas observaciones sugieren que el reloj circadiano podría controlar no sólo el momento del día en que los intervalos de reposo y actividad ocurren, sino también el tipo de actividad locomotora que las moscas llevan a cabo. Las moscas desempeñan durante el día una actividad locomotora diferencial, habiendo momentos en los que ponen huevos, se alimentan, exploran, duermen, copulan, entre otras actividades. En nuestro grupo hemos observado marcadas diferencias de género en el uso del espacio. En este proyecto analizaremos la hipótesis de que estos comportamientos están asociados a un uso diferencial del espacio a lo largo del día y están regulados por el reloj circadiano. Por lo tanto estas preferencias por el uso del espacio se pueden alterar modulando los circuitos neuronales que controlan el reloj molecular. En el laboratorio contamos con un repertorio de diferentes moscas transgénicas con alteraciones en distintos componentes neuronales del reloj circadiano. Planeamos hacer una comparación detallada de esta dependencia en moscas normales y en moscas con alteraciones en distintos grupos de neuronas relojeras. Se registrará la actividad motora en tiempo real usando cámaras de video registrando en el rango del visible y también en el infrarrojo, para monitorear actividad diurna y nocturna. Se propone: a) optimizar el set-up experimental del cuál dispone el grupo, incluyendo el software utilizado (escrito en lenguaje Python) para la detección y seguimiento de individuos en tiempo real; b) Desarrollar un análisis estadístico de los datos generados, comprendiendo variables tales como trayectoria, velocidad, tiempos de exploración, dependencias espaciales, tiempos de alimentación y de reproducción, entre otros.

## 9. Determinación de Propiedades Eléctricas de Células de Mamíferos utilizando Arreglos de MicroElectrodos de tamaño celular

**Director:** Fabián Bonetto (bonetto@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Laboratorio de Cavitación y Biotecnología – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Física en Medicina y Biología – **Orientación alternativa:**

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:**

**Descripción:** Existe un gran interés en la medición de las propiedades eléctricas de células de mamíferos tanto desde un punto de vista básico como de aplicaciones tecnológicas. Midiendo la impedancia espectral de una monocapa de células podemos discriminar la presencia de distintos tipos de células. Por otra parte utilizando lasers de potencia sintonizable podemos inducir el disparo de una neurona en particular. En ambos casos partimos de un arreglo de microelectrodos de oro producidos por litografía sobre un sustrato (típicamente vidrio o silicio intrínseco). El diámetro de estos microelectrodos circulares es normalmente de 250 micrones. Sobre este microelectrodo se depositan del orden de 200 células. Por lo tanto son inadecuados para la discriminación de células y para la detección de la actividad eléctrica de una sola neurona. En nuestro laboratorio hemos desarrollado un sistema integrado que permite medir propiedades eléctricas en microelectrodos de 15 micrones de diámetro. Este diámetro corresponde al diámetro de una sola célula. Las dificultades para este tipo de medición son las capacidades parasitas y el ruido electromagnético. Utilizando los dispositivos presentes en las salas limpias del CAB y del CAC podemos construir un gran número de microelectrodos de tamaño celular. Con este sistema se podría medir la impedancia espectral como función del tiempo de una célula y la actividad eléctrica de una neurona a la vez en una gran cantidad de células. La ventaja de esta última técnica con el tradicional método de empalmeamiento es que en lugar de una neurona se pueden medir la actividad eléctrica de un gran número de neuronas simultáneamente. La limitación en el número de células o neuronas que se pueden medir simultáneamente viene dado por el número de contactos hacia la electrónica exterior (típicamente entre 24 y 96 contactos). Proponemos eliminar esta limitación utilizando un laser de potencia sintonizable como multiplexor. Partiremos de una oblea de silicio intrínseco aislante. Produciremos electrodos de oro en ambos lados de la oblea. En la cara superior un gran número de microelectrodos del tamaño de una célula. En la cara inferior el número estándar de 96 electrodos que utilizamos habitualmente. Enfocaremos el laser sintonizable en un microelectrodo de la cara superior a través de la cara inferior. La pequeña zona de la oblea de silicio iluminada por el laser se convertirá en conductora eléctrica. A través del uso de arreglos de espejos guimbales bidimensionales se podrán conectar a la electrónica exterior

los microelectrodos de interés. Utilizaremos para los experimentos de discriminación de células una línea celular de células sanas y una cancerígena. Para los experimentos con neuronas la línea celular N2A. En nuestro laboratorio poseemos amplia experiencia en la producción de monocapas de estas líneas celulares. Para forzar el disparo de una neurona en particular iluminaremos con un pulso rápido de un laser de potencia. Utilizando un colorante fluorescente y con un microscopio podremos fotografiar la señal eléctrica en el axón producida por el soma excitado a través del laser. Para el experimento de discriminación de células sembraremos una mezcla de las células sanas y de las cancerígenas. Las células cancerígenas se reproducen más rápido que las sanas por lo que las colonias de las cancerígenas van ocupando una mayor superficie que las sanas. El sistema propuesto nos permitirá monitorear el crecimiento de dichas colonias. Este plan de trabajo propone el desarrollo de un sistema que permita medir un gran número de microelectrodos de tamaño celular y aplicarlo a la medición de las propiedades eléctricas de células de mamíferos (sanas, cancerígenas y neuronas). En una primera etapa mediremos las propiedades de impedancia espectral de células aisladas aplicando técnicas estadísticas a los resultados. Caracterizaremos la relación entre el laser que ilumina el silicio intrínseco y la conductancia eléctrica producida, tanto en su magnitud como en la región espacial afectada. Utilizando microelectrodos de tamaño celular mediremos por separado una monocapa de células cancerígenas y una de células normales. Produciremos una monocapa de células neuronales. Aplicaremos un pulso laser a un punto de la monocapa celular. Utilizaremos intensidades crecientes hasta que una neurona dispare. Como diagnostico detectaremos este disparo utilizando un colorante fluorescente. Utilizaremos los microelectrodos descriptos anteriormente para detectar las señales eléctricas producidas. El lugar propuesto para este trabajo es el Laboratorio de Cavitación y Biotecnología del CAB. El laboratorio cuenta con todos los equipos para realizar este trabajo. Utilizamos regularmente las salas limpias del CAB y del CAC para fabricar nuestros arreglos de microelectrodos. La financiación para la línea de investigación en la que se insertará el trabajo particular propuesto para esta maestría están garantizados por el subsidio PICT 2014-2833.

## 10. Aplicaciones de óptica no lineal

**Director:** Diego Grosz (grosz@ib.edu.ar)

**Lugar de trabajo:** Grupo de Comunicaciones Ópticas (GCO), Ingeniería en Telecomunicaciones, IB – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Física Tecnológica – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Computacional – **Metodología secundaria:** Experimental

### Descripción:

1- Objetivo general de la propuesta: El objetivo general es el del desarrollo de una plataforma de simulación de efectos ópticos no lineales basada en un paradigma de computación paralela, que permita comprender la dinámica de estos procesos, aplicada, específicamente, a los sistemas ópticos de alta capacidad, la generación de supercontinuo y rogue waves, con aplicación a fuentes sintonizables de pulsos ultracortos, y a la generación de radiación en el rango del infrarrojo medio mediante procesos paramétricos. Paralelamente, se llevarán a cabo experimentos en las áreas mencionadas para validar los resultados obtenidos.

2- Objetivos específicos de la propuesta: Mediante la simulación numérica de procesos de óptica no lineal, se busca cuantificar la penalización inducida por los mismos en enlaces de fibra óptica de alta capacidad, que operan a tasas de Gbps por canal, y que transportan información modulando la amplitud y/o fase del campo eléctrico. Se estudiarán, además, efectos ópticos no lineales en el contexto de la generación de supercontinuo en fibras de cristal fotónico, buscando entender la dinámica de las rogue waves y su relación con la producción de pulsos ultracortos sintonizables. Por último, se abordará el problema de la generación de radiación en el rango del infrarrojo medio mediante técnicas de suma y diferencia de frecuencias en cristales no lineales. De esta forma, los objetivos específicos de la propuesta son:

2.1- Desarrollo de una aproximación novedosa al problema de la simulación de efectos ópticos no lineales en medios con linealidades de 2do y 3er orden mediante la implementación y optimización del algoritmo de Split Step Fourier en un entorno paralelo basado en procesadores del tipo GPU.

2.2- Aplicación de los resultados del punto anterior a la simulación de efectos no lineales en sistemas de comunicación óptica de alta capacidad.

2.3- Aplicación de los resultados de 2.1 al estudio de la generación de supercontinuo y de eventos esporádicos de alta intensidad (rogue waves) en fibras de cristal fotónico.

2.4- Estudio de la generación de radiación en el rango del infrarrojo medio (> 10 micrones) mediante esquemas de amplificación paramétrica en cristales con no linealidad de segundo orden.

2.5- Realización de experimentos de generación de supercontinuo en PCFs mediante bombeo de pulsos ultracortos y validación de los resultados numéricos del objetivo 2.3.

2.6- Realización de experimentos de generación en el rango del infrarrojo medio mediante experimentos de mezcla de tres ondas en cristales no lineales y validación de los resultados del objetivo 2.4.

## 11. Dispersión aerodinámica de polvos cohesivos

**Director:** Nicolás Silin (silin@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Materiales Nucleares – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Física Tecnológica – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** El trabajo se centra en el estudio de la dispersión de las partículas de polvo que se encuentran aglomeradas mediante fuerzas aerodinámicas o de impacto. La dispersión es un proceso tecnológico de gran importancia e interés en la actualidad, no solo en el ámbito industrial sino por su relevancia en la administración de drogas secas por vía pulmonar. El estudio es de carácter experimental utilizando fotografía de alta velocidad y análisis de imágenes. El objetivo es caracterizar los diferentes mecanismos de falla de los aglomerados y que pueden ser aprovechados para la dispersión de polvos cohesivos minimizando su contaminación y retención en el dispositivo diseñado a tal fin. El trabajo involucra el uso y posiblemente la modificación de dispositivos electrónicos, la captura de imágenes con tiempos de exposición por debajo de 1 microsegundo y el procesamiento de las imágenes obtenidas, entre otros.

## 12. Desarrollo y automatización de un magnetómetro de gradiente de campo alterno.

**Director:** Alejandro Butera (butera@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** División de Resonancias Magnéticas – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Física Tecnológica – **Orientación alternativa:** Ciencia de Materiales

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

### Descripción:

#### Introducción

El desarrollo de equipamiento experimental en un laboratorio de investigación es indispensable para la caracterización de distintos sistemas, ya que proporciona herramientas adicionales para el estudio de sus propiedades. Permite además adaptar las técnicas experimentales dependiendo de las necesidades del investigador. Particularmente en el área de los materiales magnéticos existen distintos magnetómetros que permiten determinar el momento magnético total o la magnetización de un compuesto. Entre estos se encuentra el magnetómetro de gradiente alterno de fuerzas (AGM por sus siglas en inglés) que es uno de los magnetómetros más sensibles que existen para la caracterización de películas delgadas, logrando alcanzar sensibilidades del orden de  $10^{-8}$  emu. Este tipo de magnetómetro se diferencia de los convencionales debido a su capacidad de detectar momento magnético a través de la fuerza que siente una muestra (sujeta a un piezoeléctrico o bimorfo) cuando está sometida a un gradiente de campo alterno de alta frecuencia. Esto permite medir ciclos de histéresis de sistemas nanométricos, de muy baja señal magnética, en períodos muy cortos de tiempo.

#### Objetivos

El objetivo general del trabajo consiste de dos partes: continuar con la formación de recursos humanos en el área de desarrollo de equipamiento experimental e instrumentación y contribuir con la implementación de nuevas técnicas experimentales adaptables a las necesidades de un laboratorio de investigación. Para alcanzar este objetivo se propone de manera específica la automatización y optimización de un AGM para el estudio de las propiedades magnéticas de películas delgadas de muy baja señal magnética. Se requiere un alumno con inclinación hacia la instrumentación y el desarrollo de equipamiento experimental.

#### Metodología

Durante el último año, en el Laboratorio de Resonancias Magnéticas se rea-

lizaron las primeras pruebas que verificaron el correcto funcionamiento de un AGM capaz de alcanzar una sensibilidad del orden de  $10^{-7}$  emu. Estas pruebas involucraron la construcción y prueba del sensor piezoeléctrico bimorfo para la detección de la magnetización; diseño, construcción y prueba de las bobinas de excitación que generan un gradiente de campo lineal (características dc y ac de las bobinas); Diseño, construcción y prueba del tubo de montaje, la suspensión antivibratoria y el conexionado eléctrico.

El trabajo se desarrollará en las siguientes etapas:

1. Mejora de la configuración experimental: montaje de muestras y rediseño del soporte del portamuestras.
2. Selección de un patrón de calibración y la adaptación de un electroimán para realizar barridos de campo magnético.
3. Automatización del AGM
4. Estudio de las propiedades magnéticas de distintos sistemas nanoestructurados testigo para evaluar la sensibilidad del AGM.
5. Diseño de un sistema que permita variar la temperatura de la muestra y realizar medidas en función de ángulo.

Se plantea una tesis co-dirigida ya que el Dr. Butera aportará su experiencia en propiedades físicas de materiales magnéticos y el Dr. Luis Avilés posee experiencia en la fabricación y caracterización de heteroestructuras ferromagnéticas y en diseño instrumental.

### 13. Antenas ópticas multiescala para la detección óptica ultrasensible de moléculas

**Director:** Alejandro Fainstein (alex.fainstein@gmail.com)

**Lugar de trabajo:** Laboratorio de Fotónica y Optoelectrónica – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Física Tecnológica – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** Los biosensores utilizan técnicas físicas como transductores de procesos químicos y biológicos en dispositivos que permiten la detección ultrasensible y específica de moléculas. En el caso de los biosensores basados en la resonancia de plasmones superficiales (SPR), un proceso de reconocimiento molecular determinado por anticuerpos específicos a la molécula que se quiere detectar induce un cambio en la reflectividad de luz incidente sobre la superficie donde los anticuerpos están químicamente inmovilizados. Este cambio en la reflectividad se detecta ultrasensiblemente acoplando la luz a través de antenas ópticas basadas en resonancias plasmónicas de sistemas metálicos nanoestructurados. Así mismo, la detección específica utilizando antenas ópticas puede lograrse sin el uso de anticuerpos, explotando en su lugar la especificidad de técnicas de espectroscopía óptica, como ser el Raman amplificado por resonancias de plasmones (SERS).

Esta propuesta de trabajo se centra en el diseño y prueba de nuevos conceptos para el desarrollo de antenas ópticas apropiadas para la detección óptica ultrasensible de moléculas, incluso al nivel de la molécula única. Es conocido que nanoestructuras metálicas optimizadas son capaces de producir amplificaciones del campo a nivel local de varios órdenes de magnitud, lo cual ha abierto la posibilidad de detectar moléculas únicas, e incluso procesos de carga y descarga de estas a nivel de electrones individuales [1]. La limitación en general es que estas nanoestructuras tienen baja sección eficaz para acoplamiento del campo lejano. Alternativamente es posible diseñar resonadores que acoplan muy eficientemente el campo lejano, pero que generan campos locales con amplificaciones modestas. Recientemente hemos demostrado que es posible sacar provecho de lo mejor de ambos mundos, el buen acoplamiento del campo lejano, y la gran amplificación en el campo cercano, mediante el diseño de antenas multiescala [2]. Esto se logró generando rugosidad controlada a nivel de la nanoescala, en microcavidades esféricas muy similares a las antenas parabólicas. El objetivo de esta propuesta de tesis es avanzar en esta estrategia utilizando diseños específicos y crecimiento controlado de nano-microestructuras metálicas, tanto con métodos ‘bottom-up’ (químicos) como ‘top-down’ (con litografía electrónica).

El estudiante se verá involucrado en el diseño y modelado de las estructuras, así como en experimentos de SPR y de espectroscopía Raman incluyendo estra-

tegias para el monitoreo de moléculas relevantes a problemas de medio ambiente y de salud, y para la detección de moléculas únicas.

La propuesta se financia en el marco de proyectos científicos (Proyecto PICT 2015 de la Agencia Nacional de Promoción Científica y Técnica (ANPCyT) código PICT-2015-1591, ‘Antenas ópticas multi-escala: transporte electrónico en moléculas únicas y monitoreo ultrasensible de moléculas para aplicaciones en medio ambiente y salud’.), y tecnológicos (PPL 2011 de la ANPCyT, ‘Plataforma para el Desarrollo de Nanobiomateriales y Dispositivos para Diagnóstico, Tratamiento y Detección’, Proyecto INTA 2013-2019 ”Los agroquímicos como fuente de contaminación difusa en agro-ecosistemas”), y de contratos de servicios tecnológicos con la empresa Nanodetección-CITES. Es parte de un proyecto tecnológico para el desarrollo de sistemas mejorados de detección específica de moléculas relevantes en temas ambientales y de salud.

[1] Monitoring the electrochemistry of single molecules by surface-enhanced Raman spectroscopy, Emiliano Cortés, Pablo G. Etchegoin, Eric C. Le Ru, Alejandro Fainstein, María E. Vela, and Roberto C. Salvarezza, *Journal of the American Chemical Society* 132, 18034 (2010).

[2] Synergetic light-harvesting and near-field enhancement in multi-scale patterned gold substrates, Luis A. Guerra Hernández, María Antonieta Daza Millone, Emiliano Cortés, Marcos Federico Castez, Baptiste Auguie, María E. Vela, Roberto C. Salvarezza, and Alejandro Fainstein, *ACS Photonics* 2 (9), 1355 (2015).

## 14. Fabricación y caracterización eléctrica de juntas superconductor/aislante/superconductor

**Director:** Nestor Haberkorn (nhaberk@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Laboratorio de Bajas Temperaturas – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Física Tecnológica – **Orientación alternativa:** Ciencia de Materiales

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** Juntas túnel del tipo superconductor / aislante / superconductor (SAS) tienen numerosas aplicaciones dentro de la microelectrónica. Estas aplicaciones incluyen dispositivos tales como dispositivos superconductores de interferencia cuántica (SQUIDS), circuitos digitales de alta velocidad y sensores de radiación. En este trabajo se propone la fabricación y caracterización de juntas SAS basadas en nitruros de metales de transición como electrodo superconductor. Como barrera aislante se propone la utilización de materiales tales como AlN, Zr<sub>3</sub>N<sub>4</sub> y Zr<sub>0.5</sub>Hf<sub>0.5</sub>O<sub>2</sub>. Las dos primeras barreras propuestas son aislantes eléctricos compatibles químicamente con los electrodos superconductores. El Zr<sub>0.5</sub>Hf<sub>0.5</sub>O<sub>2</sub> se caracteriza por ser un material ferroeléctrico y ofrece la posibilidad de sintonizar parámetros tales como la longitud de atenuación de la barrera mediante polarización eléctrica. Este último efecto no se ha reportado en la literatura.

El plan de trabajo incluye las siguientes técnicas experimentales: pulverización catódica (crecimiento de muestras); difracción de rayos X (estructura cristalina); microscopía de fuerzas atómicas convencional y conductora (topografía y análisis electrónico de las barreras); litografía óptica (fabricación de la junta) y transporte eléctrico a bajas temperaturas (caracterización de la junta).

## 15. Caracterización, diseño y fabricación de una celda de combustible de óxido sólido portátil de pequeña escala

**Director:** Laura Baqué (baquel@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Laboratorio de Caracterización de Materiales y Óxidos no-estequiométricos, Centro Atómico Bariloche – **Lugar de trabajo alternativo:**

-

**Orientación:** Física Tecnológica – **Orientación alternativa:** Ciencia de Materiales

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** Las celdas de combustible de óxido sólido (Solid Oxide Fuel Cells - SOFC) son dispositivos electroquímicos que permiten generar electricidad y calor a partir de un combustible (hidrógeno, o hidrocarburos) y oxígeno. Las SOFCs consisten en un ensamble de tres capas cerámicas (cátodo/electrolito/ánodo) con un espesor de 10-100 micrones cada una. El electrolito es denso mientras que los electrodos (cátodo y ánodo) son porosos. El principio de operación de estas celdas involucra la reducción del oxígeno en el cátodo, la conducción de iones de oxígeno a través del electrolito, y la oxidación del combustible en el ánodo. En las SOFC convencionales, el electrolito requiere de altas temperaturas (700-1000 °C) para permitir la conducción de los iones de oxígeno. Sin embargo, en las últimas décadas, la temperatura de operación de las SOFCs disminuyó al rango 500-700 °C gracias al desarrollo de nuevos materiales. Este logro no sólo permitió reducir el costo y aumentar la durabilidad de las celdas sino que también abrió la posibilidad de utilizar estas celdas para aplicaciones portátiles de baja potencia en el rango de 1-100 W como, por ejemplo, la recarga de celulares y laptops. A pesar de su aún elevada temperatura de operación, las SOFCs presentan múltiples ventajas para su uso en aplicaciones portátiles. A diferencia de las celdas de combustibles de baja temperatura (como por ej. Las PEM o las de metanol directo), las SOFCs no sólo funcionan con hidrógeno sino también con combustibles de mayor densidad de energía como butano, propano o etanol. Además, su recarga es rápida y sencilla ya que consiste en rellenar el combustible con el que operan y no en realizar un lento proceso electroquímico inverso como ocurre con las baterías. Por todo esto, las SOFCs son dispositivos muy prometedores para las aplicaciones portátiles de baja potencia y actualmente existe varios prototipos demostrativos a nivel laboratorio y un prototipo comercial de la empresa eZelleron de Alemania. El objetivo de esta propuesta de maestría es la caracterización, diseño y fabricación de una celda de combustible de óxido sólido portátil de pequeña escala (1-10W). La lista tentativa de tareas a desarrollar incluye: 1) la fabricación de la celda SOFC (ensamble ánodo/electrolito/cátodo), 2) caracterización microestructural básica de la SOFC usando técnicas de ciencias de materiales (por ej.: microscopía electrónica, difracción de rayos X, etc.), 3) Caracterización del rendimiento electroquímico

de la SOFC (por ej.: espectroscopía de impedancia compleja, conductividad, curvas I-V), 4) diseño de la 'hot box' portátil que contendrá la celda SOFC aislada térmicamente del exterior y permitirá el ingreso y egreso de los gases de alimentación y escape (esta etapa incluye por ej.: determinación de las condiciones de operación en base a la caracterización microestructural y electroquímica realizada previamente, revisión del estado del arte, selección de materiales de aislación, interconexión y sellado, evaluación de las distintas configuraciones mediante modelado con software, etc.), 5) fabricación de la 'hot box' portátil, 6) evaluación del funcionamiento de la celda y la 'hot box' en condiciones reales de operación, y 7) evaluación económica del dispositivo desarrollado con vistas a su aplicación comercial.

## **16. Dinámica de fluidos no newtonianos en dispositivos de microfluidica**

**Director:** Hernan Pastoriza (hpastoriza@gmail.com)

**Lugar de trabajo:** Instituto de Nanociencia y Nanotecnología – **Lugar de trabajo alternativo:** MZP Tecnología

**Orientación:** Física Tecnológica – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** Se propone el estudio analítico y experimental del estudio de la dinámica de líquidos no newtonianos en distintos dispositivos de microfluidica con el objetivo de ampliar las capacidades de un microviscosímetro ya diseñado.

## 17. Desarrollo de simulador de propulsor de efecto Hall

**Director:** José M Relloso (relloso@invap.com.ar)

**Lugar de trabajo:** INVAP SE – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Física Tecnológica – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Computacional – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** Los objetivos de este trabajo son modelar el comportamiento dinámico de una tobera de propulsión iónica de efecto hall con el fin de desarrollar un simulador que pueda conectarse a la electrónica de control, y de esta manera poder ensayar a lazo cerrado todas las fases de operación desde el encendido hasta la regulación de fuerza nominal. Esto permitiría realizar ensayos extendidos explorando márgenes respecto a los valores nominales de operación y de esa manera ajustar y verificar la robustez del circuito de control, antes de realizar pruebas con la tobera real en cámara de termovacio, donde solo pueden realizarse ensayos de verificación con duración y amplitud acotada.

## 18. Evolución biológica en el origen de la vida: Transmisión de genes horizontal versus vertical.

**Director:** Sebastián Bouzat (bouzat@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Grupo de Física Estadística e Interdisciplinaria. – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Sistemas Complejos – **Orientación alternativa:** Física en Medicina y Biología

**Metodología principal:** Teórico – **Metodología secundaria:** Computacional

**Descripción:** Una de las teorías más aceptadas hoy en día sobre el origen de la vida y de la evolución biológica, basada en las ideas de C. R. Woese, indica que la vida se originó en una comunidad de especies u organismos microscópicos que tenían la capacidad, no sólo de replicarse, sino también de intercambiar material genético entre individuos. Este tipo de transmisión de genes, llamado transmisión horizontal, sigue ocurriendo en la actualidad en algunas clases de bacterias. La propuesta de trabajo consiste en el estudio y el desarrollo de modelos matemáticos que permitan entender cómo se pasó de un mecanismo de evolución biológica comunitario, en el que primaba la transmisión horizontal de genes, a una evolución basada en individuos, en la que domina la transmisión vertical, es decir, de padres a hijos. En primer lugar, el alumno se familiarizará con los resultados del modelo propuesto en Arnoldt et.al. Phys.Rev.E 92, 052909 (2015). Luego se buscarán generalizaciones y mejoras, en particular en lo que hace al tratamiento de las poblaciones, los detalles de las interacciones y la definición de los paisajes de fitness, con el fin de identificar más claramente cuáles son los elementos esenciales para que ocurra la transición evolutiva antes mencionada.

El tema puede conectarse con el estudio de la evolución cultural, ámbito en el que también se habla de coexistencia de mecanismos verticales y horizontales de transmisión de información. Esta conexión puede ser una posibilidad de trabajo adicional, si fuera de interés del alumno.

El alumno cursará materias del ámbito de la física estadística, los sistemas dinámicos, los sistemas complejos y la matemática aplicada a la biología. Se familiarizará con técnicas analíticas y computacionales de dichas áreas, que serán necesarias para el desarrollo del trabajo.

## 19. La ecuación de Hamilton-Jacobi y los sistemas mecánicos forzados.

**Director:** Sergio Grillo (sergrill@gmail.com)

**Lugar de trabajo:** Instituto Balseiro – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Sistemas Complejos – **Orientación alternativa:**

**Metodología principal:** Teórico – **Metodología secundaria:**

**Descripción:** Descripción: Las cantidades conservadas en un sistema dinámico facilitan notablemente la resolución (total o parcial) de sus ecuaciones de movimiento. En el caso de sistemas Hamiltonianos, si el número de tales cantidades coincide con el número de grados de libertad del sistema, y si además esas cantidades conmutan en relación al corchete de Poisson canónico, las ecuaciones pueden resolverse exactamente, en el sentido que es posible exhibir una fórmula explícita (a menos de cuadraturas) de las trayectorias del mismo. Se dice en tal caso que el sistema es 'integrable.' Recordemos que, por otro lado, la integrabilidad es equivalente a la existencia de soluciones completas de la ecuación de Hamilton-Jacobi (EHJ) (ver Arnold, 1978). Para sistemas Hamiltonianos con vínculos, no se ha podido establecer hasta el momento una condición análoga a la de integrabilidad (ver Bates & Cushman, 1999), es decir, una condición que asegure la solubilidad exacta de las ecuaciones de movimiento de estos sistemas. En los últimos años se han desarrollado teorías que permiten hablar del análogo a la EJH para sistemas con vínculos noholónomos estándar y generalizados (ver Balseiro et al, 2010; Cariñena et al 2006 y 2010). Sin embargo, tales teorías no han permitido aún obtener la condición buscada. Recientemente, en Grillo & Padrón (2016), se ha elaborado una teoría de Hamilton-Jacobi para sistemas dinámicos generales, con su EHJ asociada, la cual extiende a la teoría clásica para sistemas Hamiltonianos sobre variedades simplécticas, de Poisson y de cuasi-Poisson (los cuales contienen a los sistemas noholónomos). Quisiéramos en este trabajo particularizar dicha teoría al caso de sistemas Hamiltonianos con fuerzas externas. Dado que los sistemas con vínculos son sistemas de esta clase (siendo las fuerzas externas las fuerzas de vínculo asociadas), esperamos por este camino acercarnos a la condición antedicha.

V. Arnold (1978), *Mathematical models in classical mechanics*, Springer.

L. Bates, R. Cushman (1999), *Rep. Math. Phys.* 44, 29-35.

P. Balseiro, J.C. Marrero, D.M. de Diego, E. Padrón (2010), *Nonlinearity* 23, 1887-1918.

J. Cariñena, X. Gracia, G. Marmo, E. Martínez, M. Muñoz-Lencada, N. Román-Roy (2006), *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics* 3 Nro. 7, 1417-1458.

J. Cariñena, X. Gràcia, G. Marmo, E. Martínez, M. Muñoz-Lencada, N. Román-Roy (2010), *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics* 7 Nro. 3, 431-454.

S. Grillo, E. Padrón, *Journal of Geometry and Physics* 110 (2016), 101-129.

## 20. Aspectos de Información Cuántica en Teoría de Campos

**Director:** Gonzalo Torroba (torrobag@gmail.com)

**Lugar de trabajo:** Grupo de Partículas y Campos, CAB – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Partículas y Campos – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Teórico – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** La teoría cuántica de campos (QFT) describe sistemas cuánticos con infinitos grados de libertad, y juega un rol central en modelos de altas energías y sistemas fuertemente correlacionados en materia condensada. Como en mecánica estadística, la dinámica de QFTs se puede estudiar en términos de fases y sus puntos críticos, siendo los más importantes las teorías conformes, y fases con escalas de masa generadas dinámicamente (confinamiento, superconductividad).

El Grupo de Renormalización (RG) propone reorganizar la teoría de campos en términos de acciones efectivas que cambian con la escala de energía, y busca encontrar los grados de libertad que dominan los procesos cuánticos a una dada escala. Usando el RG se puede analizar el diagrama de fases de la QFT, y encontrar flujos entre distintos puntos críticos.

En años recientes se ha comenzado a estudiar la dinámica de QFTs en términos de cantidades de información cuántica, como la entropía de entrelazado. Esto revela que dichas teorías comparten varias propiedades con otros sistemas termodinámicos. En particular, una pregunta central es si el RG es irreversible, es decir, si el número de grados de libertad siempre decrece hacia el infrarrojo. Para teorías relativistas, esto fue probado en 1+1, 2+1 y 3+1 dimensiones de espacio-tiempo.

Este trabajo propone profundizar el estudio de la dinámica de QFTs en términos de información cuántica. En particular, se estudiarán nuevas medidas de información que permitan caracterizar la estructura del RG y encontrar resultados no perturbativos. Asimismo, se buscará extender varios de los resultados relativistas anteriores a modelos no relativistas, donde la invariancia de Lorentz está rota. Estas teorías son de interés en sistemas interactuantes de materia condensada.

## 21. Algunos aspectos del efecto Casimir dinámico

**Director:** Francisco Diego Mazzitelli (fdmazzi@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** División de Partículas y Campos - Centro Atómico Bariloche – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Partículas y Campos – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Teórico – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** Se denomina ‘efecto Casimir dinámico’ (ECD) a una gran variedad de fenómenos en los cuales se produce excitación del campo electromagnético (creación de fotones) debida a condiciones externas dependientes del tiempo. Las fluctuaciones cuánticas del vacío son fundamentales para entender este fenómeno.

Originalmente el efecto fue estudiado desde el punto de vista teórico considerando conductores neutros acelerados, a los efectos de modelar la radiación de Hawking de agujeros negros. Esta situación es relevante actualmente en estudios de electrodinámica y optomecánica en cavidades. En los últimos años se analizan también otras situaciones físicas como guías de onda superconductoras con condiciones de contorno dependientes del tiempo, perturbaciones del índice de refracción en fibras ópticas, fricción cuántica, etc. De hecho el ECD fue observado experimentalmente en 2011 en guías de onda superconductoras.

Se propone analizar algunos de los siguientes aspectos del ECD:

- muy recientemente (R. Merlin, Phys. Rev. A 95, 023802, 2017) se ha puntualizado que la inserción o movimiento de un objeto polarizable en una cavidad grande produciría una cantidad divergente de fotones infrarrojos, análogamente a lo que ocurre en algunos sistemas de materia condensada. Se estudiarán eventuales consecuencias observables de este fenómeno, comparándola con las divergencias infrarrojas típicas que aparecen en teoría de campos, tanto en electrodinámica como en cromodinámica cuántica.

- También recientemente, hemos demostrado que la fuerza entre conductores neutros estáticos debida a las fluctuaciones del vacío dependen de que los conductores estén aislados o conectados a reservorios de carga C. Fosco, F. Lombardo y F. Mazzitelli, Phys. Rev. D 94, 085024, 2016). Se propone estudiar la generalización de este fenómeno al ECD.

- En los últimos años hay un creciente interés en el análisis de la denominada ‘fricción cuántica’, que ocurre cuando objetos planos se mueven paralelamente con una velocidad relativa constante. Debido a las fluctuaciones del vacío, aparece una fuerza dependiente de la velocidad cuando los objetos no son conductores perfectos. Se propone el análisis sistemático de las fuerzas entre objetos que se

mueven lateralmente con velocidades arbitrarias, utilizando un desarrollo perturbativo en la constante de acoplamiento entre el campo cuántico y los objetos móviles.

## **22. Determinación de la escala de energía del Observatorio Pierre Auger con detectores de centelleo**

**Director:** Xavier Bertou (bertou@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Grupo Partículas y Campos – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Partículas y Campos – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** El Observatorio Pierre Auger, ubicado en Mendoza, es el observatorio de rayos cósmicos de mayor tamaño a nivel mundial. Tras acumular datos durante más de 10 años, se inició una nueva fase consistiendo en complementar los detectores del Observatorio: a cada uno de los 1600 detectores Cherenkov se le agregará un detectores de centelleo. La comparación de las señales medidas por ambos tipos de detectores permitirá establecer con mayor claridad la naturaleza de los rayos cósmicos de las más altas energías que se observan. En Octubre del 2016, se instaló un arreglo de prototipos de los detectores de centelleo en una llamada celda unitaria. Tras 6 meses de validación, los detectores se encuentran funcionando y los primeros datos se están adquiriendo. Se propone en este trabajo analizar estos datos y obtener una nueva escala de energía para el Observatorio, aprovechando el hecho de que los detectores de centelleo permiten una muy buena medición de la cascada electromagnética, la cual se relaciona directamente con la energía del rayo cósmico primario.

### **23. Teorías de gravedad modificada y su relación con el problema de la energía gravitatoria**

**Director:** Franco Fiorini (francof@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Grupo de Partículas y Campos – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Partículas y Campos – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Teórico – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** Como es sabido, la definición de energía gravitatoria en el contexto de la Relatividad General, posee larga data y un prontuario importante de dificultades inabordables en la formulación estándar. Sin embargo, la teoría de Einstein en su formulación teleparalela presenta una estructura más acorde para indagar sobre este asunto, puesto que lleva a una corriente conservada de carácter puramente gravitatorio. Sin embargo, esta corriente no transforma adecuadamente ante el grupo de Lorentz, por lo que resulta fútil al nivel de la teoría de Einstein. Remarcablemente, sí transforma adecuadamente ante transformaciones del grupo remanente presente en las teorías de gravedad modificada de tipo  $f(T)$ . La corriente conservada así definida permitirá, por ejemplo, ofrecer un punto de vista innovativo hacia la comprensión de la termodinámica de los agujeros negros.

### **24. Compactificaciones en Teoría de Cuerdas, Teoría Doble de Campos y fenomenología**

**Director:** Gerardo Aldazabal (aldazaba@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Grupo de Partículas y Campos – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Partículas y Campos – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Teórico – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** Se abordarán las compactificaciones de cuerdas en presencia de los llamados flujos no-geométricos generalizados.

Estos flujos están asociados a modos masivos de enrollamiento de la cuerda cerrada y su significado es por lo tanto oscuro desde el punto de vista de la supergravedad efectiva en 10 dimensiones. Una propuesta para abordar su estudio es a través de la llamada Teoría de Campos Doble (DFT) donde estos flujos adquieren una interpretación geométrica.

El trabajo propuesto profundizará en el estudio de la Teoría de Campos Doble. Desde el punto de vista de aplicaciones fenomenológicas se intentará utilizar el

marco de la DFT, en compactificaciones con flujos generalizados, a la construcción de modelos de inflación con axiones.

## 25. Simulación de los procesos de Interacción entre moléculas y superficies de SiO<sub>2</sub>.

**Director:** Matias Nuñez (matias.nunez@gmail.com)

**Lugar de trabajo:** Materiales Nucleares, Centro Atómico Bariloche – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Ciencia de Materiales – **Orientación alternativa:** Ciencia de Materiales

**Metodología principal:** Teórico – **Metodología secundaria:** Computacional

**Descripción:** Los materiales vítreos y cerámicos poseen propiedades físicas, químicas y nucleares que son aprovechadas en diferentes aplicaciones. Estas aplicaciones dependen no solo de las propiedades físico-químicas del vidrio o cerámico sino también de su presentación geométrica (tamaño, forma, porosidad, etc.) y características superficiales. Una presentación de particular interés en la industria en general y en particular en aplicaciones médicas es la de microesferas. El laboratorio de Materiales Nucleares del CAB se ha especializado en el desarrollo de materiales vítreos y cerámicos, principalmente orientados a la industria nuclear y sus aplicaciones. En los últimos años además se ha comenzado a desarrollar materiales vítreos de uso en medicina nuclear. En ese contexto se detectó rápidamente la relevancia de las microesferas, generándose una importante línea de trabajo que luego permitió también el desarrollo de microesferas para transporte de drogas y vidrios para separación de elementos. Paralelo a las líneas experimentales y tecnológicas, hay en el laboratorio una línea de trabajo teórico, de desarrollo y aplicación de técnicas de cálculo computacional de primeros principios para la simulación de estos sistemas físico químicos con el objetivo de entender en detalle los procesos involucrados. Se propone simular las interacciones entre moléculas de interés y superficies vítreas en el marco de la Teoría del Funcional de Densidad para poder determinar que parámetros o propiedades del sistema compuesto superficie-molécula pueden ser variados para obtener grados arbitrarios de adherencia.

## 26. Informática de materiales y estructura electrónica.

**Director:** Matias Nuñez (matias.nunez2@gmail.com)

**Lugar de trabajo:** Materiales Nucleares, Centro Atómico Bariloche – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Ciencia de Materiales – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Computacional – **Metodología secundaria:** Teórico

**Descripción:** El diseño de materiales con propiedades físicas y químicas deseadas es un desafío en la ciencia de Materiales. Las propiedades de los materiales dependen directamente de un gran número de variables, lo cual hace que su predicción sea una tarea compleja. Estas variables incluyen sus elementos constitutivos, estructuras cristalinas, características electrónicas y geométricas, entre otras. El rápido crecimiento en la investigación de materiales ha llevado a la acumulación de grandes cantidades de datos. Por ejemplo, la Inorganic Crystal Structure Database (ICSD) (ref.1) incluye más de 170 000 entradas. Los datos experimentales también están incluidas en otras bases de datos, como MatWeb (<http://www.matweb.com>) y MatBase (<http://www.matbase.com>). Además, hay varias bases de datos grandes, en constante crecimiento, resultado del High-throughput Materials Discovery (ref. 3) como AFLOWLIB (<http://www.afowlib.org/>), Materials Project (<https://materialsproject.org/>) y Harvard Clean Energy Project (<http://cleanenergy.molecularspace.org/>) que contienen miles de materiales y sus propiedades físico químicas teóricamente calculadas. Estas propiedades incluyen perfiles de estructura electrónica estimados con métodos cuánticos, con el método de DFT principalmente (Kohn y Sham ganaron un premio nobel en 1998 por esta teoría). Estas últimas bases de datos tienen un gran potencial para servir como una fuente para el descubrimiento de nuevos materiales funcionales. Candidatos prometedores pueden ser seleccionados para una confirmación experimental usando enfoques de diseño racional. El rápido crecimiento del compendio de datos teóricos en estas bases de datos ofrece una oportunidad única para el descubrimiento científico. Partiendo de la idea de que las propiedades de Materiales son una función directa de su estructura; materiales con estructuras similares (determinado por sus características constitucionales, topológicas, espaciales, y electrónicas) probablemente tengan características físicas y propiedades químicas. Con este enfoque, métodos de Data Mining y Machine Learning (Ref. 2,3) se están desarrollando y utilizando para analizar estas enormes bases de datos y descubrir patrones en las propiedades de los materiales. Encontrar estas características especiales, o “fingerprints”, que señalen materiales con las propiedades fisicoquímicas deseadas, es un activa área de investigación. Se propone en esta propuesta el cálculo de transporte electrónico en materiales cristalinos, en el marco de la Teoría del Funcional de densidad (DFT) y usando el formalismo de Landauer. Se propone estudiar la

relación entre el transporte electrónico y la distribución de carga en los orbitales de valencia involucrados en los procesos de transporte electrónico, a partir de la Densidad de estados (resultado del cálculo de DFT) . De esta manera, se definirá un parámetro relacionado con conductividad electrónica, rápidamente calculable a partir de información contenida en las bases de datos y que pueda utilizarse como un “fingerprint” para la búsqueda y estudio de materiales.

1- Bergerhoff, G.; Hundt, R.; Sievers, R.; Brown, I. D. J. Chem. Inf. Comput. Sci. 1983, 23, 66-69 2- Jain, Anubhav, Geoffroy Hautier, Shyue Ping Ong, and Kristin Persson. “New Opportunities for Materials Informatics: Resources and Data Mining Techniques for Uncovering Hidden Relationships.” Journal of Materials Research 31, no. 08 (April 2016): 977–94. doi:10.1557/jmr.2016.80. 3- Curtarolo, Stefano, Gus L. W. Hart, Marco Buongiorno Nardelli, Natalio Mingo, Stefano Sanvito, and Ohad Levy. “The High-Throughput Highway to Computational Materials Design.” Nature Materials 12, no. 3 (February 20, 2013): 191–201. doi:10.1038/nmat3568.

## 27. Metrología de radiaciones ionizantes con Resonancia Paramagnética Electrónica

**Director:** Alejandro Butera (butera@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** División Resonancias Magnéticas – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Ciencia de Materiales – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** Existen distintos materiales en los que la radiación ionizante produce defectos que perduran en el tiempo y que pueden utilizarse como sensores. La presencia de estos defectos (generalmente radicales libres) puede sensarse en forma no destructiva con la técnica de resonancia paramagnética electrónica (EPR), que se utiliza desde hace varias décadas para estimar dosis tanto en emergencias radiológicas como en terapias y en procesos industriales con radiación. En aplicaciones biomédicas se prefiere que el material utilizado como dosímetro posea propiedades similares al tejido biológico para evitar correcciones en la determinación de la dosis recibida. Para facilitar la interpretación de las medidas espectroscópicas es deseable que la señal de EPR que produce la radiación en estos materiales sea estable temporalmente y relativamente lineal con la dosis recibida. Entre los materiales que presentan estas propiedades encontramos: L-Alanina, Hydroxyapatita (constituyente del esmalte dental), Formiato de Litio, Calcita, Methylalanina, Sacarosa, etc.

Objetivos

-Estudiar la dependencia de la señal de EPR en algunos de estos materiales cuando se los somete a radiaciones ionizantes de distinta naturaleza y/o energía (fundamentalmente fotones y/o neutrones), para ampliar el conocimiento en situaciones aún no investigadas en condiciones de campo único o campo mixto.

-Determinar qué materiales sensores de radiación ionizante son los más adecuados para cubrir los intervalos de dosis entre 100mGy a 100 kGy.

-En el caso de un campo de radiación mixto (neutrones+fotones) se aspira a diseñar un sensor (por ejemplo alanina o formiato de litio con boro) para medir la dosis total, diferenciando ambas contribuciones, y que sea a la vez utilizable como instrumento para la caracterización de haces. Se conoce que hay una fuerte dependencia con la mesoestructura del sensor por lo que es importante el estudio de materiales fabricados a partir de soluciones con distintos solventes.

-Cuantificar el número de defectos producidos por la radiación realizando medidas comparativas con una muestra patrón (por ej.  $Al_2O_3:Cr^{3+}$ ) con un número conocido de iones paramagnéticos.

-Profundizar el conocimiento de la respuesta a la radiación ionizante de materiales presentes en el entorno, de modo de estar preparados para estimar dosis recibidas en una eventual emergencia radiológica.

Irradiación de Muestras. Para la irradiación con fotones gamas se ha contactado al personal responsable de la facilidad existente en el Centro Atómico Ezeiza (Eva Pawlak). Este laboratorio tiene trazabilidad con patrones primarios para determinar las dosis aplicadas, por lo que se pueden fabricar patrones secundarios para el uso cotidiano en nuestro laboratorio. En el caso de neutrones existe acceso al Reactor RA6 del Centro Atómico Bariloche a través de Juan Longhino, con quien hemos comenzado una colaboración. Dentro de la CNEA también existen facilidades para irradiar con electrones o iones.

Se plantea una tesis co-dirigida ya que el Dr Butera aportará su experiencia en propiedades físicas de materiales magnéticos y absorción de microondas y la Dra Alejandro posee experiencia en la fabricación por ruta química de las muestras que serán estudiadas.

## 28. Fabricación y caracterización de esponjas de Cu-Ni-Al por métodos de pulvimetalurgia

**Director:** Maria Teresa Malachevsky (malache@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Física de Metales – **Lugar de trabajo alternativo:** Nuevos Materiales y Dispositivos

**Orientación:** Ciencia de Materiales – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** Los materiales celulares metálicos pueden absorber gran cantidad de energía debido a que se compactan de manera irreversible al deformarse plásticamente. En particular, las esponjas metálicas con propiedades pseudo-elásticas (memoria de forma) permiten extender el empleo de estos materiales a sollicitaciones dinámicas con alto nivel de deformaciones de manera reversible, considerando su posible utilización en dispositivos amortiguadores o en actuadores. Para lograr buenas propiedades elásticas se necesita un material con tamaño de grano pequeño. Esto se logra fabricando las esponjas por pulvimetalurgia empleando formadores de poros. Se eligen partículas de algún material y se mezclan con el metal en polvo (o mezcla de metales si es una aleación). Luego se compacta por prensado o vibración y se sinteriza bajo la atmósfera adecuada para consolidar la esponja. Finalmente, las partículas formadoras de poros son eliminadas por disolución o tratamiento térmico dejando un espacio vacío en su lugar, formando así una celda. Se propone poner a punto un método de preparación de esponjas de aleaciones de Cu-Al-Ni por pulvimetalurgia empleando formadores de poros, teniendo en cuenta los parámetros claves del proceso para lograr diferentes densidades y distribuciones de celdas. El uso de este método permite un control preciso de las características de las celdas (tamaño, forma y distribución) pero el empleo de metales en polvo lleva a tener una porosidad asociada a las paredes de las mismas que afecta a las propiedades mecánicas. Hay que seleccionar el material a usar como preservador de espacio y los parámetros de sinterizado (presión, temperatura, atmósfera y tiempo). Se analizarán las fases presentes mediante difracción de rayos x y microscopía óptica y de barrido (SEM). Mediante tomografía de rayos x se visualizará en 3D la distribución de las celdas y se obtendrá una caracterización completa de la porosidad analizando los datos tomográficos.

## **29. Diseño de nuevos materiales y su respuesta como sensores de gases y compuestos volátiles**

**Director:** Martín Eduardo Saleta (martin.saleta@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** División Resonancias Magnéticas – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Ciencia de Materiales – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** El presente proyecto se enmarca en el estudio sistemático de las propiedades físicas de diferentes óxidos de metales de transición nanoestructurados que presentan estructuras cristalinas tipo curundum y perovskita (simples y dobles). Para alcanzar el objetivo se prevé la síntesis y caracterización de películas y microesferas nanocristalinas crecidas por técnicas de spray pyrolysis, equipamiento desarrollado en nuestro laboratorio. Esta técnica permite obtener muestras de altísima calidad, bajo costo y permiten sintonizar la forma y tamaño de las estructuras. Se realizarán estudios morfológicos, estructurales, magnéticos y eléctricos de los materiales sintetizados, con el fin de obtener resultados básicos sobre la transferencia, acumulación y confinamiento de carga y espín en los bordes de grano. La estructura cristalina será caracterizada mediante difracción de rayos X y la morfología mediante microscopía electrónica de transmisión y de barrido. Las propiedades magnéticas de las nanoestructuras se estudiarán utilizando un magnetómetro SQUID y un espectrómetro de resonancias magnéticas de spin (ESR). Se realizarán mediciones de resistencia eléctrica e impedancia en función de la temperatura y diferentes atmósferas (gases y compuestos volátiles). La comprensión e interpretación de estos estudios permitirá analizar la viabilidad de estos nanomateriales para su potencial uso tecnológico en el área de sensores de gases y compuestos orgánicos volátiles.

### 30. Nanopartículas bimagnéticas con estructura core/shell: fabricación, propiedades magnéticas y magnetotransporte

**Director:** Elin Winkler (winkler@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Resonancias Magnéticas – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Ciencia de Materiales – **Orientación alternativa:** Materia Condensada

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** Este trabajo tiene como objetivo general la fabricación de nuevos materiales magnéticos nanoestructurados con el fin de estudiar las nuevas propiedades que se manifiestan como consecuencia de la reducción del tamaño y avanzar hacia el diseño de sistemas con propiedades específicas. En particular la posibilidad de fabricar nanopartículas con estructura core/shell que combinan materiales con diferente orden y anisotropía magnética agrega nuevos grados de libertad al sistema dando origen a nuevos efectos y posibilitando la optimización y sintonización de determinadas propiedades [1]. Además del efecto de superficie y el desorden estructural debido a la alta relación superficie/volumen, estos sistemas presentan distinto grado de acople magnético en la interfaz lo cual determina la respuesta dinámica y estática del momento magnético de las nanopartículas. Teniendo en cuenta el amplio campo de aplicación de estos sistemas que se extiende desde la fabricación de nuevos imanes permanentes, grabación magnética de alta densidad, absorción de microondas hasta aplicaciones biomédicas, es fundamental comprender el origen de las interacciones que gobiernan su comportamiento magnético poder controlar su respuesta ya que cada aplicación requiere nanopartículas de características diferentes [2]. En este marco se propone estudiar la anisotropía magnética efectiva, el efecto de exchange bias y la estabilidad térmica del momento magnético de nanopartículas bimagnéticas con estructura core/shell. Con este fin se fabricarán nanopartículas de Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> encapsuladas con Co<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, variando x entre 0 y 1, de esta manera al reemplazar el Co<sup>2+</sup> (3d<sup>7</sup>) con Zn<sup>2+</sup> (3d<sup>10</sup>) se disminuirá la intensidad del acople de intercambio en la interfaz. Además se pretende avanzar en la fabricación de aglomerados y sistemas autoensamblados con el fin de estudiar la magnetorresistencia de estas nanoestructuras. Se analizarán los resultados en base a modelos fenomenológicos que tengan en cuenta las características de cada una de las fases involucradas y las interacciones presentes.

[1] Lavorato, G. C.; Lima Jr, E.; Tobia, D.; Fiorani, D.; Troiani, H. E.; Zysler, R. D.; Winkler, E. L. Size Effects in Bimagnetic CoO/CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> Core/shell Nanoparticles. *Nanotechnology* 2014, 25, 355704.

[2] López-Ortega, A., Estarder, M., Salazar-Alvarez, G., Roca, A. G., & Nogués, Applications of exchange coupled bi-magnetic hard/soft and soft/hard magnetic

core/shell nanoparticles. Phys. Rep. 553, 1-32 (2015).

### **31. Almacenamiento de hidrógeno en materiales base Mg: efecto de aditivos en fase líquida**

**Director:** Guillermina Urretavizcaya (urreta@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Departamento Físicoquímica de Materiales, Gerencia Investigación Aplicada – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Ciencia de Materiales – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** La problemática energética y la demanda de un combustible alternativo, sustentable y limpio se ha incrementado en los últimos años, y se espera que siga haciéndolo en el futuro. Una de las opciones para satisfacer esta demanda es la utilización de hidrógeno como vector de energía. En este contexto, la comunidad científica y tecnológica se enfrenta al desafío de desarrollar y optimizar los aspectos relacionados con la producción, el almacenamiento y el transporte de hidrógeno. Este trabajo se enmarca en la temática del almacenamiento. Específicamente, proponemos trabajar en almacenamiento de hidrógeno en materiales formadores de hidruros base Mg. Uno de los problemas que subsisten en estos sistemas es la cinética lenta con la que el material incorpora y libera hidrógeno a temperaturas cercanas a la ambiente. Para hacer frente a esta limitación una de las estrategias empleadas es agregar al material formador de hidruros aditivos con función catalítica. En esta propuesta ofrecemos estudiar los efectos de incorporar aditivos base Nb en fase líquida al hidruro de magnesio, en lugar de los aditivos sólidos habitualmente utilizados. Esta diferencia permitiría, entre otras cosas, obtener una mejor distribución del aditivo, uno de los aspectos fundamentales para lograr una mejora cinética eficiente con un bajo contenido de aditivos. El trabajo abarca la síntesis de los materiales por molienda mecánica, su caracterización físicoquímica y termodinámica empleando técnicas convencionales de caracterización de materiales y el estudio específico de la interacción de los mismos con el hidrógeno (cinética de hidruración y deshidruración, propiedades de equilibrio). Los resultados se compararán con estudios previos de aditivos base Nb en fase sólida.

## **32. Microscopía electrónica de alta resolución aplicada al estudio del endurecimiento por precipitación en aleaciones de aluminio**

**Director:** Alfredo Tolley (tolley@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** División Física de Metales – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Ciencia de Materiales – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** Las aleaciones de aluminio tienen importantes aplicaciones con materiales estructurales en la industria aeronáutica y automotriz, entre otras, debido a su baja densidad. Las propiedades mecánicas requeridas para estas aplicaciones se logran por diferentes mecanismos. En las aleaciones denominadas termoenviejables, se agregan diversos aleantes, como por ejemplo Cu, Zn, Mg, Si, etc., que se disuelven a altas temperaturas, cercanas a los 500°C, formando una solución sólida. Mediante un enfriado muy rápido, o templado, desde alta temperatura, se puede retener la solución sólida a temperatura ambiente. Con un tratamiento de recocido a temperaturas de alrededor de 200°C, los elementos disueltos precipitan formando partículas de tamaño nanométrico con una estructura cristalina diferente a la matriz de aluminio, las cuales provocan el endurecimiento del material y lo hacen apto para las aplicaciones. El grado de endurecimiento obtenido depende de la distribución de las partículas precipitadas, la cual es muy sensible a la concentración de los aleantes. También el agregado de elementos en baja concentración, o microaleantes, puede influir significativamente en los procesos de precipitación alterando la distribución y estructura de los precipitados. La microscopía electrónica de transmisión es una técnica ideal para estudiar la distribución de los precipitados, su dependencia con la composición y la eficacia para lograr el endurecimiento deseado. En este trabajo se propone estudiar la distribución de precipitados y su evolución durante el recocido a temperaturas intermedias en aleaciones de Al, mediante la microscopía electrónica de transmisión. Se prepararán aleaciones de Al con diferentes composiciones. Se realizarán tratamientos térmicos para lograr la precipitación controlada de partículas de tamaño nanométrico y se estudiará su densidad, estructura, composición, morfología y distribución con microscopía electrónica de transmisión. El trabajo se llevará a cabo en las instalaciones de la División Metales del Centro Atómico Bariloche, que cuenta con uno de los microscopios electrónicos de transmisión más modernos del país, Tecnai F20, que permite una caracterización detallada hasta escala atómica.

### **33. Crecimiento y caracterización de heteroestructuras semiconductoras de AlGaAs por MBE**

**Director:** Hernan Pastoriza (hpastoriza@gmail.com)

**Lugar de trabajo:** San Carlos De Bariloche – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Ciencia de Materiales – **Orientación alternativa:** Materia Condensada

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** Utilizando el recientemente instalado equipo de Molecular Beam Epitaxy se crecerán multicapas de distintas composiciones de AlGaAs para su utilización en distintos dispositivos optoelectrónicos. Se utilizarán técnicas de RHEED, RX, Rutherford Back scattering, espectroscopía, Microscopía de barrido y de transmisión y mediciones de transporte eléctrico para caracterizar estas estructuras y sintonizar los parámetros óptimos de crecimiento.

### 34. Sintonización de propiedades ópticas en dispositivos fotónicos mediante la utilización de grafeno

**Director:** Julián (milano@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Laboratorio de Resonancias – **Lugar de trabajo alternativo:** Laboratorio de Telecomunicaciones

**Orientación:** Ciencia de Materiales – **Orientación alternativa:** Materia Condensada

**Metodología principal:** Computacional – **Metodología secundaria:** Fenomenológico

**Descripción:** El presente plan tiene como objetivo central el estudio de dispositivos fotónicos integrados que incorporan una película delgada de materiales 2D, como por ejemplo grafeno, los cuales permiten procesar señales de microondas hasta frecuencias que pueden superar los 100 GHz, ser sintonizados de manera muy rápida y con tensiones muy bajas. Este tipo de dispositivos y tecnologías es actualmente un tema de alto impacto en el mundo científico y tecnológico debido a las bondades y características sobresalientes que presentan en aplicaciones de electrónica y fotónica en general. En este caso se tiene interés en investigar su utilización en los sistemas de telecomunicaciones que operan en el rango de las microondas (comunicaciones móviles y datos inalámbricos), sistemas satelitales, sistemas de radar y radioastronomía.

Particularmente se propone, estudiar mediante simulaciones de elementos finitos y modelos numéricos, la implementación de guías de onda de silicio sobre aislante (silicon-on-insulator, SOI) y nitruro de silicio (Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>) con una capa de grafeno acoplada. Estas capas de material 2D permiten cambiar el índice de refracción efectivo de la guía de onda, en una cantidad (del orden de 10<sup>-3</sup>) que depende del voltaje aplicado. Esto brinda la posibilidad de sintonizar propiedades de los dispositivos fotónicos dependientes del índice de refracción con pequeñas variaciones de voltaje (entre 0 y 10 volts). Las aplicaciones centrales de estudio serán un anillos simples y acoplados para la generación de peines de frecuencias y sistemas biestables.

### **35. Interacción magnética en películas delgadas estudiada a través de reflectometría polarizada de neutrones**

**Director:** Julián Milano (milano@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Laboratorio de Resonancias Magnéticas – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Ciencia de Materiales – **Orientación alternativa:** Materia Condensada

**Metodología principal:** Fenomenológico – **Metodología secundaria:** Experimental

**Descripción:** La reflectometría es una técnica experimental que nos permite conocer propiedades estructurales y magnéticas en función de la profundidad de materiales fabricados como películas delgadas de unos pocos a centenas de nanómetros de espesor. En general, otras técnicas nos permiten conocer una propiedad en volumen, es decir un valor promedio de dicha propiedad a largo de la muestra, o lo que sucede en la superficie. Pero la reflectometría nos da la posibilidad de identificar lo que sucede en las capas internas del material. Esto lo hace una técnica muy poderosa ya que a través de ésta podemos reconstruir el perfil en profundidad de propiedades estructurales y magnéticas. Dentro de los propiedades magnéticas que se pueden estudiar podemos citar el acoplamiento magnético entre dos capas de distinto material. Este acoplamiento puede estar originado por la llamada interacción de intercambio o por la interacción dipolar magnética. Como ambas contribuciones tienen diferentes rangos de alcance, sus efectos sobre la configuración magnética de la muestra será distintivo de cada contribución. En este plan proponemos estudiar dichas interacciones en bicapas formadas por dos materiales magnéticos, permalloy ( $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}$ ) y FePt. El espesor de cada capa es tal que ambos materiales presentan una particular estructura de dominios que aumentan la interacción dipolar magnética. Para estudiar esto se propondrán modelos magnéticos que serán utilizados para modelar las curvas de reflectometría de neutrones polarizados. De dichos resultados se espera obtener información del acoplamiento magnético entre a capas a través de la determinación de la estructura magnética. Este plan se enmarca en la formación de futuros usuarios del equipamiento que estará disponible en el Laboratorio Argentino de Haces de Neutrones (LAHN) así como de las técnicas de análisis de los datos obtenidos.

### **36. Aplicaciones de propiedades plasmónicas a la detección molecular mediante resonancia de plasmones superficiales (SPR).**

**Director:** María Laura Pedano (ml.pedano@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Laboratorio de Fotónica y Optoelectrónica, Centro Atómico Bariloche, CNEA. – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Ciencia de Materiales – **Orientación alternativa:** Física en Medicina y Biología

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** La excitación colectiva de los electrones de un sólido metálico mediante el acoplamiento con el campo eléctrico de la luz incidente origina la propagación de plasmones en la superficie. La resonancia de plasmones superficiales en interfaces metal-dieléctrico (SPR, por ‘Surface Plasmon Resonance’) es una técnica plasmónica no específica pero simple, basada en mediciones de reflectividad óptica del campo eléctrico de la luz incidente acoplado con los plasmones de la superficie. Se mide la modificación en la resonancia óptica producida por el cambio en el índice de refracción del medio, que ocurre como consecuencia del enlace específico de una molécula analito al sustrato. La especificidad para su uso en sensores puede lograrse modificando la superficie plasmónica con elementos de bio-reconocimiento, por ejemplo con anticuerpos, secuencias de ADN, enzimas o péptidos, que reconozcan e interactúen específicamente con el analito de interés [1]. Con ésta técnica se ha logrado obtener sensibilidades de partes por billón o trillón en una diversidad de aplicaciones. El objetivo principal de esta propuesta de maestría apunta a aplicar los fenómenos físicos de resonancia de plasmones superficiales a sistemas de sensado que permiten resolver problemas actuales de la sociedad; como ser la detección de pesticidas en muestras de agua, o de biomoléculas indicadoras de enfermedades cancerígenas o infecciosas olvidadas, como el Mal de Chagas. En particular, se busca lograr la mejor forma de inmovilizar las biomoléculas de reconocimiento en la superficie, de modo de optimizar razonadamente las condiciones experimentales y obtener la mejor afinidad de interacción posible para lograr una mejor sensibilidad en los parámetros analíticos de la metodología de detección. El estudiante se verá involucrado principalmente en experimentos de SPR para la construcción del sensor, así como de espectroscopía Raman incrementada por superficie (SERS), elipsometría y electroquímica, para la caracterización complementaria de la capa de bioreconocimiento. La propuesta se financia en el marco de los siguientes proyectos científicos: PICT-2015-1591 ‘Antenas ópticas multi-escala: transporte electrónico en moléculas únicas y monitoreo ultrasensible de moléculas para aplicaciones en medio ambiente y salud’; y SeCTyP-UNCuyo ‘Superficies y nanoestructuras con propiedades plasmónicas aplicadas a la detección de moléculas relevantes para el agro y la salud’.

[1] SPR Biosensing MUA/Poly-L-lysine Platform for the Detection of 2,4- Dinitrophenol as Small Molecule Model System. M. Antonieta DazaMillone, Eduardo A. Ramirez, Cecilia Y. Chain, Andrea Crivaro, David Romanin, Martín Rumbo, Guillermo Docena, Mauro D. Cocco, María L. Pedano, Alejandro Fainstein, Jorgelina Montoya, María E. Vela, and R. C. Salvarezza, *Journal of Nanomaterials*, Volume 2016, Article ID 5432656, 9 pages, <http://dx.doi.org/10.1155/2016/5432656>

### 37. Nanoestructuras plasmónicas: Aplicaciones a la detección molecular por SERS

**Director:** María Laura Pedano (ml.pedano@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Laboratorio de Fotónica y Optoelectrónica, Centro Atómico Bariloche, CNEA. – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Ciencia de Materiales – **Orientación alternativa:** Física en Medicina y Biología

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** El campo de la nano y micro-fotónica estudia la capacidad de concentrar la distribución espacial de la luz en escalas del orden o menor que la longitud de onda empleada, con el objetivo de amplificar la interacción entre la luz y las moléculas ancladas a una superficie, a través de excitaciones plasmónicas en sólidos o nanoestructuras. Cuando la luz interactúa con nanopartículas de metales nobles, la alta densidad de electrones libres puede resultar en oscilaciones colectivas conocidas como ‘resonancia de plasmones superficiales’, lo cual provee a estas nanoestructuras con propiedades ópticas únicas, como una absorción y dispersión óptica fuertemente aumentada, así como la focalización de la luz incidente en regiones localizadas del espacio con campos cercanos fuertemente amplificados. Estas propiedades han sido intensamente estudiadas en las últimas décadas, y una aplicación práctica de las mismas es la espectroscopía de dispersión Raman amplificada por superficie (SERS) [1] La amplificación del campo electromagnético se da particularmente en puntas agudas y en cavidades nanométricas entre corrugaciones de los metales. Los factores de amplificación [2], que determinan su aplicación en estudios analíticos cuantitativos, dependen fuertemente de estas rugosidades, dimensión de las cavidades, forma, tamaño y orientación de las nanoantenas [3, 4]. Estructuras apropiadamente diseñadas pueden ser desarrolladas para actuar como antenas para la colección eficiente de luz. El objetivo principal de esta propuesta de maestría consiste en el diseño, optimización, fabricación y empleo de superficies nanoestructuradas y nanoestructuras metálicas con propiedades plasmónicas (principalmente nanoantenas ópticas o nanoalambres), que permitan la amplificación del campo electromagnético en los sitios de localización de biomoléculas relevantes para la salud, de modo de mejorar la sensibilidad obtenida SERS, para ser aplicados a la detección de biomoléculas indicadoras de enfermedades cancerígenas o infecciosas olvidadas, como el Mal de Chagas. En particular, se busca optimizar y controlar la geometría, rugosidad, orientación espacial sobre el sustrato, y eventualmente la composición metálica de las nanoantenas o sustratos plasmónicos para lograr la mayor reproducibilidad y amplificación posible de sus propiedades. Por otro lado, dichos sustratos y nanoantenas podrían ser acoplados a sistemas de transporte eléctrico o a sistemas electroquímicos, para obtener información complementaria, ya sea en forma secuencial o simultánea, de modo de

poder obtener así sistemas que permitan la detección dual, tanto espectroscópica como eléctrica de moléculas conductoras que puedan ser empleadas como cables o interruptores moleculares a nivel de estudios básicos, o de especies electroactivas, secuencias de ADN, marcadores de enfermedades cancerígenas o infecciosas olvidadas, inmovilizados previamente en nanocavidades generadas entre las nanoantenas o superficies plasmónicas, para ser aplicados al estudio y detección de eventos de bioreconocimiento y/o interacciones biomoleculares. El estudiante se verá involucrado en la fabricación de las nanoantenas y sustratos plasmónicos mediante diversas técnicas de síntesis (químicas, fotoquímicas, electroquímicas, haz focalizado de iones (FIB), litografía convencional y electrónica (E.beam), caracterización de nanoestructuras (por SEM o AFM), modificación química y detección de las moléculas localizadas en nanocavidades (mediante SERS, medidas de conductividad, espectroscopía IR, UV-visible). La propuesta se financia en el marco de los siguiente proyectos científicos: PICT-2015-1591 ‘Antenas ópticas multi-escala: transporte electrónico en moléculas únicas y monitoreo ultrasensible de moléculas para aplicaciones en medio ambiente y salud’; y SeCTyP-UNCuyo ‘Superficies y nanoestructuras con propiedades plasmónicas aplicadas a la detección de moléculas relevantes para el agro y la salud’.

[1] Le Ru, E. C.; Etchegoin, P. G. *Principles of Surface Enhanced Raman Spectroscopy and Related Plasmonic Effects*; Elsevier: Amsterdam, 2009

[2] Le Ru, E. C.; Blackie, E.; Meyer, M.; Etchegoin, P. G. SERS enhancement factors: a comprehensive study. 2007, 111, 13794-13803.

[3] M. L. Pedano, S. Li, G. C. Schatz, and C. A. Mirkin. Periodic electric field enhancement along gold rods with nanogaps. *Angewandte Chemie International Edition* 2010, 49, 78-82.

[4] Shuzhou Li, María L. Pedano, Gilbert Chang, Chad A. Mirkin, and George C. Schatz. Gap structure effects on SERS intensities for gold gapped-rods. *Nano Letters* 2010, 10, 1722-1727.

### **38. Soluciones exactas del problema de tres cuerpos cuántico: estructura y ionización de sistemas confinados**

**Director:** Juan Martín Randazzo (randazzo@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** División Física Atómica, Molecular y Óptica, Departamento de Interacción de la Radiación con la Materia (Colisiones Atómicas) – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Interacción Radiación-Materia – **Orientación alternativa:** Interacción Radiación-Materia

**Metodología principal:** Computacional – **Metodología secundaria:** Teórico

**Descripción:** La descripción de la dinámica de un sistema de partículas livianas viene dada, en el régimen no relativista, por la solución de la ecuación de Schrödinger correspondiente a dicho sistema. Para el caso de dos cuerpos el tratamiento es relativamente simple (exacto en muchos casos). Para el caso de tres cuerpos, el número de variables y términos de acoplamiento en la ecuación incrementa la complejidad de la misma al punto en que sólo es posible evaluar soluciones mediante métodos numéricos.

La propuesta de trabajo consiste, primeramente, en implementar un código de cálculo desarrollado en el División Física Atómica, Molecular y Óptica del Departamento de Interacción de la Radiación con la Materia. El mismo se basa en una expansión en términos de Funciones Sturmianas Generalizadas, que permite calcular tanto estados estacionarios (independientes del tiempo) como evolución temporal del estado preparado de tres partículas.

Es posible estudiar dos tipos de soluciones. Por un lado, los estados ligados de un dado hamiltoniano, de cuadrado integrable y reducida extensión espacial, que describen energías y estructura del sistema (autoestados). Por otro lado, podemos evaluar estados de scattering, de extensión espacial infinita (ondas esféricas correlacionadas) que describen todos los posibles estados finales asintóticos en una colisión (único autoestado del continuo). Para tener una idea de la complejidad de estos objetos, podemos mencionar que la representación matricial del hamiltoniano asociado a una sola onda parcial puede llegar a rondar los 150 Gb de memoria. Uno de los objetivos es la disminución de estos recursos mediante el empleo de coordenadas hyperesféricas, o evaluación ‘on the fly’ de los elementos de matriz mediante el uso de procesadores gráficos (GPUs).

La variedad de sistemas que pueden tratarse es muy amplia, como el de tres partículas cargadas (átomo de He, colisión positrón-Hidrógeno, e-H etc), o la interacción entre tres átomos. Para este último caso se emplea como potencial una “superficie” de energía potencial que se calcula previamente a partir de la dinámica electrónica en la aproximación de Born-Oppenheimer. También puede

considerarse la interacción de partículas con superficies, y problemas de ionización de átomos confinados. Muy pocos de estos sistemas han sido tratados en la bibliografía actual, por lo cual quedan muchos otros por explorar.

El objetivo de la tesis propuesta consiste en calcular soluciones de problemas de tres cuerpos, particularmente en el régimen de colisión y estudiar la dinámica del sistema a partir de la inspección gráfica, cálculo de observables, detección de vórtices y cálculo de trayectorias cuánticas (teoría de De Broglie-Bohm). Se busca además hallar una nueva forma de calcular secciones eficaces de colisión a partir del cálculo de trayectorias cuánticas. Empleando el campo de velocidades asociado a una función de onda, es posible definir la sección eficaz en forma equivalente a la mecánica clásica. De esta manera podrían evitarse los problemas formales en la teoría de colisiones con interacciones Coulombianas, que provienen de ambigüedades en la definición de los estados asintóticos en una colisión.

Una vez finalizado el trabajo el interesado dispondrá de la herramienta para darle el uso que desee en futuras investigaciones.

### 39. Interferencias cuánticas en la emisión electrónica coherente desde moléculas diatómicas

**Director:** Sergio Suárez (suarez@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Laboratorio Tandem, División Colisiones Atómicas – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Interacción Radiación-Materia – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** Estudios recientes de la emisión de electrones desde hidrógeno molecular por el impacto de iones rápidos han mostrado la existencia de efectos de interferencia. Las interferencias se manifiestan como oscilaciones en la velocidad (o Energía) de los electrones expulsados [1], y son análogos a la interferencia de la luz en el experimento de dos rendijas de Young [2]. Las frecuencias de las estructuras oscilatorias dependen fuertemente del ángulo de observación y en menor medida de la velocidad de colisión. Además, se han observado oscilaciones secundarias con frecuencia entre 2 a 3 veces más altas, superpuestas sobre las oscilaciones primarias. Se discute sobre el origen físico de tales oscilaciones, así como sobre la propia existencia de las mismas. Más recientemente, algunos estudios se han centrado en moléculas diatómicas más complejas que  $H_2$ , incluyendo  $N_2$  y  $O_2$ , para las cuales se observan estructuras debidas a interferencias secundarias.

Este novedoso efecto cuántico sobre la emisión de electrones no cuenta aún con suficientes datos experimentales y, en particular, se duda de las oscilaciones de alta frecuencia observadas para protones sobre blancos de  $H_2$ . Las capacidades actuales del laboratorio del acelerador Tandem de la División Colisiones Atómicas del Centro Atómico Bariloche son las adecuadas para la realización de un estudio sistemático de este efecto con diversos proyectiles y blancos, en un amplio rango de energías. Se propone un estudio experimental de la emisión electrónica desde blancos moleculares ( $H_2$ ,  $N_2$  y  $O_2$ ) con proyectiles desnudos ( $H^+$ ,  $He^{2+}$  y  $Li^{3+}$ ) con energías entre 0.5 y 6 MeV para diferentes ángulos de observación. El análisis de los datos se realizará con el aporte teórico del grupo del Prof. Roberto Rivarola de la Universidad de Rosario.

[1] N. Stolterfoht et al., Phys. Rev. Lett. 87 (2001) 023201.

[2] H.D. Cohen, U. Fano, Phys. Rev. 150 (1966) 30.

## 40. Coherencia y contextualidad en procesos de colisión

**Director:** Raúl Barrachina (barra@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** División de Física Atómica, Molecular y Óptica – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Interacción Radiación-Materia – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Teórico – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** En el marco de la teoría de colisiones, tal como suele presentarse en los cursos básicos de mecánica cuántica [1] o en desarrollos más avanzados [2], se demuestra que bajo condiciones muy generales los resultados de una colisión son totalmente independientes del contexto experimental de la producción del haz de proyectiles. Esta teoría ha sido utilizada en prácticamente la totalidad de los estudios realizados hasta el momento, logrando un enorme éxito en explicar los más variados experimentos de colisiones atómicas. Sin embargo, resultados experimentales recientes [3-5] han puesto en duda los supuestos de esta teoría, demostrando que la preparación del haz de proyectiles puede afectar a la sección eficaz de colisión, ‘no por que se trate de una imperfección del experimento, sino debido a aspectos fundamentales de la mecánica cuántica’ [4]. En particular, han puesto en cuestionamiento las hipótesis de coherencia del haz de proyectiles utilizadas en la teoría de colisiones usual.

Recientemente mostramos como esta contextualidad del proceso de colisión podía explicarse en función de una pérdida de coherencia del haz de proyectiles [6]. En este marco se propuso [7] una definición natural para el grado de coherencia de un haz de partículas, demostrándose una versión cuántica del teorema de van Cittert-Zernike de la Óptica Física, mediante el cual en un haz inicialmente incoherente emerge una región de coherencia espacial.

El objetivo del presente proyecto de investigación es estudiar los efectos de coherencia en haces de partículas que pueden afectar los procesos de colisión. Para ello utilizaremos el método de trayectorias cuánticas de la formulación de Onda Piloto [8-10] dado que provee una forma práctica y natural de visualizar y asignar significado físico a la cantidad más importante en el estudio de la coherencia cuántica, como es la fase de la función de onda. Por último, se espera poder aplicar estos resultados para explicar los más recientes experimentos de coherencia de proyectiles en colisiones atómicas [11].

- 1) L. I. Schiff, Quantum Mechanics (McGraw-Hill, 1968).
- 2) J. R. Taylor, Scattering Theory: The Quantum Theory of Nonrelativistic Collisions (Wiley, New York, 1972).
- 3) K. N. Egodapitiya, S. Sharma, A. Hasan, A. C. Laforge, D. H. Madison, R.

- Moshhammer, and M. Schulz, Phys.Rev. Lett. 106, 153202 (2011).
- 4) S. Sharma, A. Hasan, K. N. Egodapitiya, T. P. Arthanayaka, G. Sakhelashvili, and M. Schulz, Phys. Rev. A 86, 022706 (2012).
  - 5) X. Wang, K. Schneider, A. LaForge, A. Kelkar, M. Grieser, R. Moshhammer, J. Ullrich, M. Schulz, and D. Fischer, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 45, 211001 (2012).
  - 6) L. Sarkadi, I. Fabre, F. Navarrete and R. O. Barrachina, Loss of wave-packet coherence in ion-atom collisions, Phys. Rev. A 93, 032702 (2016).
  - 7) I. Fabre, F. Navarrete, L. Sarkadi and R. O. Barrachina, Projectile coherence: The Van-Cittert-Zernike theorem revisited, J. Phys: Conf. Series 635, 042003 (2015).
  - 8) P. R. Holland, The quantum theory of motion: an account of the de Broglie-Bohm causal interpretation of quantum mechanics (Cambridge university press, 1995).
  - 9) D. Dürr and S. Teufel, Bohmian Mechanics: The Physics and Mathematics of Quantum Theory (Springer-Verlag, Berlin, 2009).
  - 10) D. Dürr, S. Goldstein and N. Zanghi, Quantum Physics Without Quantum Philosophy (Springer-Verlag, Berlin 2013).
  - 11) Por ejemplo, H. Gassert et al. Phys. Rev. Lett. 116, 073201 (2016)

## 41. Descripción de procesos de colisión en el marco de la teoría de trayectorias cuánticas.

**Director:** Raúl Barrachina (barra@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** División de Física Atómica, Molecular y Óptica – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Interacción Radiación-Materia – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Teórico – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** En 1926, pocos meses después de la publicación del famoso trabajo de Schrödinger [1], Max Born [2] intentaba por primera vez realizar una descripción cuántica de una colisión atómica; pero no lo hacía en términos de la Mecánica Ondulatoria o de la anterior Mecánica Matricial de Heisenberg, sino de la teoría de ‘ondas piloto de De Broglie’, opinando que la misma podría proveer un marco más satisfactorio para el estudio de dicho problema. Pero poco tiempo después, durante la siguiente conferencia Solvay, la formulación de onda piloto sería abandonada [3], y el programa de investigación imaginado por Born nunca llegaría a concretarse.

Recientemente se ha revalorizado [4,5] la propuesta original de Born, considerando que la teoría cuántica de onda piloto, en las reformulaciones de Bohm [6] y autores posteriores [7], en tanto que permite una descripción en términos de trayectorias cuánticas, representa una opción ventajosa para estudiar problemas de colisión. Tal es el caso, por ejemplo, del análisis de la aparición de ceros aislados en la sección eficaz múltiplemente diferencial de ionización de átomos por impacto de positrones [8] y electrones [9], que pudo ser explicada recientemente como debida a la formación de vórtices libres en la función de onda del electrón emitido [10,11]. Desde un punto de vista práctico también se puede mencionar la aplicación del método de trayectorias cuánticas [12] a diversos problemas de reacción químicas [13]. Por otra parte, resultados experimentales recientes [14] y sus correspondientes análisis teóricos [15], han demostrado que ‘la preparación del haz de proyectiles puede afectar la sección eficaz de colisión, no por que se trate de una imperfección del experimento, sino debido a aspectos fundamentales de la mecánica cuántica’. De hecho, cuando la formulación estacionaria de la teoría de scattering [16] se analiza en el marco de la teoría de onda piloto, es fácil advertir serias inconsistencias que explicarían el motivo por el cual ese aspecto crítico de la teoría no fue advertido durante décadas [17]. En este contexto resulta oportuno, y tal es el objetivo del presente proyecto, desarrollar una descripción alternativa de la teoría de colisiones en el marco de esta formulación.

**Bibliografía:**

1) Schrodinger E 1926 Annalen der Phys 384 273,

- 2) Born M 1926 Zeitschrift für Physik 38 803,
- 3) Bacciagaluppi G and Valentini A 2013 Quantum Theory at the Crossroads: Reconsidering the 1927 Solvay Conference (Cambridge University Press),
- 4) Dürr D and Teufel S 2009 Bohmian Mechanics. The Physics and Mathematics of Quantum Theory (Springer),
- 5) Dürr D, Goldstein S and Zanghí 2013 Quantum Physics without Quantum Philosophy (Springer),
- 6) Bohm D 1952 Phys. Rev. 85 166 & 180,
- 7) Holland P R 1995 The Quantum Theory of Motion: An Account of the de Broglie-Bohm Causal Interpretation of Quantum Mechanics (Cambridge University Press),
- 8) Brauner M and Briggs J S 1991 J. Phys. B 24 2227,
- 9) Murray A J and Read F H 1993 J. Phys. B 26 L359,
- 10) Macek J H et al. 2010 Phys. Rev. Lett. 104 033201,
- 11) Navarrete F et al 2013 J. Phys. B 46 115203,
- 12) Wyatt R E and Bittner E R 2000 J. Chem. Phys. 113 22,
- 13) Ver, por ejemplo, el número especial de The Journal of Physical Chemistry, 111 (41) 10171-10433 (2007),
- 14) Egodapitiya K N et al 2011 Phys. Rev. Lett. 106 153202,
- 15) Sarkadi L, Fabre I, Navarrete F and Barrachina R O 2016 Phys. Rev. A 93 032702,
- 16) Schiff L 1949 Quantum Mechanics (McGraw-Hill),
- 17) Cordeiro Ballesteros D C 2016 Descripción de procesos de colisión en las formulaciones de onda piloto e hidrodinámica de la Mecánica Cuántica. Tesis de Maestría en Ciencias Físicas (Instituto Balseiro).

## 42. Estudio de la sección eficaz neutrónica del calcio

**Director:** Javier Dawidowski (javier@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Departamento de Física de Neutrones – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Interacción Radiación-Materia – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Otro (especificar en la descripción) – **Metodología secundaria:** Experimental

**Descripción:** Una revisión de las tablas modernas y archivos de datos nucleares evaluados, muestra que, sorprendentemente, sección eficaz de dispersión de calcio tiene una sección eficaz de dispersión bastante mal determinada. Las Evaluated Nuclear Data Files, con base en la información recopilada, empleadas habitualmente en Ingeniería Nuclear, muestra inconsistencias en los datos experimentales disponibles. La falta de datos en la región de algunos eV, (normalmente empleada para definir los secciones eficaces de átomo libre que figuran en tablas) afecta la calidad de los datos. La dificultad en la medición de secciones eficaces de calcio es que la naturaleza higroscópica de los compuestos de calcio que hacen que las secciones eficaces de transmisión medidas se vean gravemente contaminadas por la señal de hidrógeno. Así, una determinación simultánea de la sección eficaz total de la transmisión y el contenido de hidrógeno de la muestra es la configuración experimental ideal para hacer las mediciones que deseamos. Este tipo de instalaciones se pueden encontrar en el espectrómetro VESUVIO del Rutherford Appleton Laboratory de Gran Bretaña, donde se han realizado experimentos en varios compuestos de calcio. El análisis de la información que se propone para este trabajo es novedoso y consiste en la utilización de la información de los 200 detectores de VESUVIO para estudiar el contenido de hidrógeno y poder deducir la sección eficaz deseada. El trabajo involucra programación y análisis estadístico. Como resultado se contribuirá a una base de datos internacional de secciones eficaces, se publicará un trabajo y se contribuirá en la creación de nuevos métodos de análisis.

### 43. Dinámica de partículas supratérmicas en plasmas de fusión

**Director:** Ricardo Farengo (farengo@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Sección Fusión Nuclear y Física de Plasmas, Gerencia de Física, CAB – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Interacción Radiación-Materia – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Teórico – **Metodología secundaria:** -

#### **Descripción:**

##### Motivación

El rendimiento de un reactor de fusión nuclear dependerá en gran medida del comportamiento de las partículas de alta energía producidas en las reacciones de fusión (p. ej. partículas alfa en la reacción D-T). Con la construcción de ITER se dispondrá, por primera vez, de un plasma con características muy semejantes a las de un reactor, en el cual las partículas alfa desempeñarán un papel fundamental. La interacción de las partículas alfa con los iones y electrones del plasma y con los campos electromagnéticos es muy compleja. Las partículas alfa entregan energía y momento al plasma a través de colisiones Coulombianas clásicas”, que a su vez producen la difusión de dichas partículas. Por otro lado, el campo magnético utilizado para confinar el plasma debe ser capaz de confinar también las partículas alfa durante suficiente tiempo como para que el proceso de transferencia de energía sea eficiente y la potencia depositada permita mantener la temperatura del plasma. El escape de partículas alfa no solo afecta el balance energético del reactor sino que puede además producir daños en la pared interna del mismo.

En todos los experimentos de fusión nuclear por confinamiento magnético se utilizan haces neutros y ondas electromagnéticas para calentar el plasma y alcanzar la temperatura necesaria para que comiencen a producirse reacciones de fusión. Esto genera una población de partículas de alta energía (supratérmicas) que debe mantenerse confinada y cuya dinámica resulta afectada por los mismos procesos indicados en el párrafo anterior.

Si bien el campo magnético ‘de equilibrio’ se calcula de modo de confinar las partículas supratérmicas (partículas alfa y haces), las fluctuaciones electromagnéticas producidas por inestabilidades pueden incrementar significativamente las pérdidas de dichas partículas produciendo transporte ‘anómalo’. Las inestabilidades pueden deberse a diversos motivos (gradientes de presión y/o densidad de corriente, etc.) pero se observa que la presencia de una población de partículas supratérmicas modifica los umbrales de estabilidad, pudiendo estabilizar algunos modos y desestabilizar otros. Es decir, debido a las partículas

supratérmicas situaciones que podrían ser inestables no lo son y viceversa. Se genera entonces una situación en la que las partículas supratérmicas pueden producir inestabilidades que luego afectan su propio confinamiento. En los últimos años se han realizado gran cantidad de estudios sobre estos temas, tanto en lo referente a procesos clásicos, como anómalos y al efecto de las partículas supratérmicas sobre las inestabilidades.

En resumen, la dinámica de las partículas supratérmicas queda determinada por el campo magnético ('de equilibrio') utilizado para confinarlas, por las colisiones (elásticas e inelásticas) con otras partículas y por la interacción con los campos electromagnéticos turbulentos producidos por las inestabilidades.

Dentro del tema general propuesto existen varias opciones:

- 1- Inestabilidades EM producidas por partículas supratérmicas (energía significativamente mayor a 10 keV).
- 2- Interacción de las fluctuaciones asociadas a las inestabilidades con las partículas supratérmicas.
- 3- Control de la dinámica de las partículas supratérmicas con ondas EM inyectadas en el plasma.

#### 44. Pérdida de energía de H+, D+ y He+ en blancos sólidos

**Director:** Esteban Cantero (canteroe@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** División Colisiones Atómicas y Física de Superficies –

**Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Interacción Radiación-Materia – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** La propuesta de este plan consiste en estudiar la pérdida de energía de iones H+, D+ y He+ transmitidos en blancos ultra-delgados metálicos (~20 nm de espesor), observando la variación de los poderes de frenamiento y la dispersión en energía en función del ángulo de observación y la energía del proyectil. El interés de estos estudios consiste en verificar la presencia o ausencia del denominado efecto umbral en la pérdida de energía de iones lentos en metales de transición, que se ha estudiado recientemente en diversos materiales. Como equipamiento experimental se utilizará el acelerador LEA con sus sistemas de espectrometrías ángulo-energía y de tiempo de vuelo existentes en los laboratorios de la División Colisiones Atómicas y Física de Superficies y las facilidades para caracterización de muestras del CAB incluyendo microscopía atómica, electrónica y espectroscopía XPS. El análisis de datos será complementado con estudios teóricos y cálculos numéricos. En tal sentido, se analizará la aplicabilidad o no de diferentes modelos teóricos para describir los efectos de interacción ion-sólido en diferentes rangos de energía, con el objetivo de explicar los resultados experimentales que se obtengan.

## 45. Excitación de plasmones en laminas de grafeno

**Director:** Silvina Segui (segui@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Bariloche – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Interacción Radiación-Materia – **Orientación alternativa:** Materia Condensada

**Metodología principal:** Teórico – **Metodología secundaria:** Computacional

**Descripción:** Tanto la investigación en grafeno como la plasmónica a escala nanométrica son áreas extremadamente activas de la física en la actualidad. Los últimos años han sido testigos del surgimiento de la plasmónica basada en grafeno como una de las más excitantes aplicaciones de la fotónica en el rango de frecuencias del Terahertz (THz) al infrarrojo (IR). Por otro lado, los desarrollos recientes en microscopía electrónica de transmisión de barrido (STEM), combinada con espectroscopía de pérdidas de energía de electrones (EELS) con resolución a nivel atómico, permiten estudiar la excitación de plasmones a frecuencias por encima del rango del infrarrojo en grafeno y otras nanoestructuras. Para el estudio de la excitación de modos colectivos electrónicos en nanoestructuras de carbono, los llamados plasmones contamos con un modelo hidrodinámico bidimensional de dos fluidos, que ha sido exitosamente aplicado para modelar espectros experimentales EELS en grafeno mono y multicapa, nanotubos de carbono monocapa, y moléculas de C60 individuales en fase gaseosa. En lo que respecta a la excitación de plasmones en grafeno, existen numerosos aspectos que todavía no han sido satisfactoriamente descritos en la literatura. En particular, podemos mencionar: variaciones de los modos de plasmones por la ondulación de una monocapa de grafeno, efectos de tamaño finito, y efectos relativistas por la alta energía de las partículas incidentes. La propuesta de este plan de trabajo, de carácter teórico, es adaptar el modelo hidrodinámico cuantizado para describir la excitación de plasmones en laminas de grafeno teniendo en cuenta alguno de los aspectos mencionados. Para esto, se desarrollará el formalismo teórico a fin de obtener las expresiones correspondientes a las cantidades de interés, como el número medio de plasmones excitados y la probabilidad de pérdida de energía de un electrón incidiendo sobre la lámina de grafeno. A partir de ello, se desarrollarán programas de cálculo numérico para obtener espectros de pérdidas de energía, estudiando dependencias con los distintos parámetros. Finalmente, se realizarán comparaciones con los resultados experimentales de la literatura.

Referencias:

+D. Mowbray, S. Segui, J. L. Gervasoni, Z. Miskovic, N. R. Arista. Phys. Rev. B 82, 035405 (2010).

+S. Segui, Z. Miskovic, J. L. Gervasoni, y N. R. Arista. J. Phys.:Cond. Matter

25 175001 (2013).

+W. S.M. Werner, A. Bellissimo, R. Leber, A. Ashraf, S. Segui. Surf. Sci. 635 1 (2015).

+Z. Miskovic, S. Segui, J. L. Gervasoni, N. R. Arista. Phys. Rev. B 94 125414 (2016).

## 46. Equilibrio magnetohidrodinámico, inestabilidades y difusión magnética en plasmas de fusión nuclear

**Director:** Pablo García Martínez (pablogm@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Sección Fusión y Física de Plasmas, Gerencia de Física, CAB – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Interacción Radiación-Materia – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Computacional – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** En los experimentos de confinamiento magnético orientados a fusión nuclear se busca mantener un plasma en las condiciones adecuadas para que se produzcan suficientes reacciones de fusión. En esas condiciones el plasma se encuentra totalmente ionizado y desde un punto de vista macroscópico puede modelarse como un fluido conductor, cuyo movimiento está afectado por las corrientes eléctricas que circulan por él (a través de la fuerza de Lorentz) y a su vez su movimiento induce campos magnéticos y por ende corrientes (leyes de Faraday y Ampere). El marco teórico para describir el comportamiento macroscópico de un plasma de esta naturaleza es la magnetohidrodinámica (MHD), que también se emplea en el estudio de numerosos plasmas que existen en el espacio.

La mayoría de los esquemas de confinamiento tienen geometría toroidal como los tokamaks, RFPs (reversed field pinch) y spheromaks. Mediante un sistema de bobinas se generan campos magnéticos y el plasma queda confinado interactuando con ellos. El punto de partida para analizar una configuración de este tipo es el equilibrio MHD que consiste en el balance de la fuerza de Lorentz y de la presión del plasma (en su versión más simple). En la primera etapa de esta propuesta de tesis, se estudiarán equilibrios axisimétricos, que pueden ser descritos mediante la ecuación de Grad-Shafranov.

Una vez que el alumno comprendido la formulación y el marco teórico del problema del equilibrio, así como los métodos de resolución, el trabajo se concentrará en una de las tres líneas de investigación siguientes, a elección del estudiante:

1) Evolución del equilibrio MHD debido a la difusión magnética en la escala de tiempo resistiva, aplicado al problema de control del perfil de densidad de corriente del plasma en tokamaks. 2) Cálculo de modos MHD inestables y su efecto en la redistribución de los productos de fusión. 3) Procesos de relajación magnética y forzado de corriente mediante inyección de helicidad en toroides compactos.

La metodología de trabajo es analítico-numérica, es decir, se basa en la formulación de modelos matemáticos en el contexto de la MHD que luego son resueltos

utilizando técnicas numéricas. Los métodos numéricos, técnicas de análisis de datos y visualización están muy relacionadas con las que se utilizan en la mecánica de fluidos computacional (esquemas en diferencias finitas, elementos finitos, volúmenes finitos, etc.).

## 47. Vórtices cuánticos en procesos de ionización

**Director:** Francisco Oscar Navarrete (navarrete@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Departamento Interacción de la Radiación con la Materia. División Física Atómica Molecular y Óptica. – **Lugar de trabajo alternativo:**

-

**Orientación:** Interacción Radiación-Materia – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Teórico – **Metodología secundaria:** Computacional

**Descripción:**

### INTRODUCCIÓN

Los vórtices cuánticos son estructuras que se presentan en diversos procesos de colisión. Su morfología y el modo en que se originan, continúa siendo fuente de gran interés científico desde que fueron propuestos teóricamente y luego evidenciados de manera experimental. La descripción completa de los mismos en sistemas de tres o más cuerpos permanece aún abierta. Su estudio ha dado lugar a una gran cantidad de trabajos de investigación en la última década en el área de la Física Atómica, Molecular y Óptica, en problemas de ionización por impacto de protones, electrones y positrones.

Su nombre proviene de su semejanza con los vórtices irrotacionales que se observan en flujos potenciales en la física de fluidos clásica. De hecho, los vórtices cuánticos son mejor comprendidos dentro de la formulación cuántica de onda piloto, también conocida como teoría de de Broglie-Bohm. En el marco de esta teoría, cada partícula exhibe una trayectoria en el espacio de coordenadas, la cual es parte de un ensamble. Este último se genera a partir de las condiciones iniciales por medio de un campo de velocidades, el cual se deriva a su vez de la función de onda. Los vórtices cuánticos son ceros en la función de onda, alrededor de los cuales el campo de velocidades es de tipo vórtice irrotacional. A diferencia de otras estructuras denominadas también vórtices en el estudio de superfluidos o gases, estos vórtices pueden aparecer durante la evolución de un sistema de pocas partículas. Si este sistema evoluciona en el continuo, pueden sobrevivir hasta distancias macroscópicas, dejando su huella en forma de ceros aislados en el correspondiente elemento de matriz de transición  $T$ . De esta manera, en los últimos años se ha logrado demostrar que ciertos mínimos encontrados previamente en la distribución de impulso de los electrones emitidos en la ionización de átomos por impacto de electrones y positrones, corresponden a vórtices cuánticos.

Hasta el momento, los vórtices cuánticos se estudiaron mayormente considerando geometrías restrictivas en el espacio de configuración de  $T$ . Sin embargo,

debido a que los vórtices son subvariedades de codimensión 2, limitar su estudio de esta manera sólo permite dar un pequeño vistazo a una estructura mucho más compleja. Por ejemplo, cuando la ionización de hidrógeno por el impacto de positrones se estudia en la geometría colineal, aparecen tres vórtices aislados. No obstante, cuando se la analiza fuera de dicha condición, se observa que corresponden a un corte plano de un anillo de vorticidad.

## OBJETIVOS

-Debido a que implicaciones de la existencia de anillos de vorticidad cuánticos en colisiones de pocos cuerpos es un gran desafío desde el punto de vista analítico, no sólo para su comprensión en particular, sino la de los vórtices cuánticos en general, se propone hacer un estudio analítico detallado de los mecanismos que dan lugar a la formación de los mismos en colisiones de ionización por impacto de positrones a energías desde decenas de electronvoltios hasta los kiloelectronvoltios.

-Luego, en un esfuerzo para entender la topología de estas fascinantes estructuras cuánticas, se propone rastrearlas numéricamente en el espacio multidimensional de  $T$ , con el fin de analizar por primera vez las superficies de vórtice, libres de cualquier geometría restrictiva.

## 48. Tolerancia a la radiación en láminas delgadas de nitruros metálicos

**Director:** Sergio Suárez (suarez@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Laboratorio de Colisiones Atómicas (CAB) – **Lugar de trabajo alternativo:** Laboratorio de Bajas Temperaturas (CAB)

**Orientación:** Interacción Radiación-Materia – **Orientación alternativa:** Ciencia de Materiales

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** La caracterización de sus propiedades electrónicas en láminas delgadas de nitruros metálicos y su correlación con la tolerancia a la radiación resulta fundamental para numerosas aplicaciones que incluyen desde microcomponentes electrónicos para usos espaciales, hasta su aplicación en sensores de radiación. Estos compuestos se caracterizan por presentar alto punto de fusión, buena conductividad térmica y extremada dureza. Desde el punto de vista electrónico existen desde compuestos dieléctricos tales como el AlN y el Zr<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, hasta materiales superconductores tales como NbN y TiN.

En este trabajo se propone crecer láminas delgadas de nitruros metálicos superconductores tales como TiN, Mo<sub>x</sub>N y NbN mediante pulverización catódica. Las propiedades estructurales y electrónicas resultantes del crecimiento podrán correlacionarse con aquellas resultantes luego de ser irradiadas con iones de diferentes energías. Se investigará el poder de frenado para diferentes iones livianos y se analizarán los cambios electrónicos generados por la implantación de los mismos.

## 49. Preparación y Estudio de Nuevas Redes Metal-Orgánico Confinadas en Superficies.

**Director:** Hugo Ascolani (ascolani@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Grupo de Física de Superficies – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Interacción Radiación-Materia – **Orientación alternativa:** Materia Condensada

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** Computacional

**Descripción:** Desde hace unos 10 años hay un interés creciente en la generación y estudio de estructuras moleculares bidimensionales (2D) generadas a partir de la co-deposición de distintos tipos de moléculas orgánicas y eventualmente átomos sobre superficies. [1] Ocurre que los átomos y moléculas depositados sobre una superficie se autoensamblan de manera espontánea generando frecuentemente estructuras 2D ordenadas con propiedades fisicoquímicas exóticas, es decir, propiedades distintas a aquellas de las estructuras formadas por los mismos elementos en 3D. Entre la gran variedad de estructuras 2D que pueden prepararse por este método se encuentran las redes metal-orgánico (MO) 2D. Dichas redes son estructuras 2D constituidas por átomos metálicos conectados entre sí mediante moléculas orgánicas. Lo más común es utilizar metales de transición como nodos metálicos, aunque recientemente el abanico de elementos utilizables se ha extendido a alkalis y tierras raras. Se considera actualmente que las redes MO podrían ser tecnológicamente relevantes por sus potenciales aplicaciones en los campos de electrónica molecular y catálisis. De hecho, es posible producir redes magnéticas 2D confinadas en superficies de metales no-magnéticos, donde la interacción magnética puede ser variada externamente, ya sea modificando la longitud de la molécula que los une, cambiando de molécula, o variando la superficie, etc. . [2] Por el lado, las redes MO se pueden diseñar de tal modo que simulen los centros activos presentes en sistemas biológicos (proteínas), lo cual permitiría desarrollar una nueva generación catalizadores. Como trabajo de Maestría proponemos estudiar redes MO magnéticas generadas en ultra-alto vacío a partir de combinar moléculas que contengan grupos carboxílicos y metales de transición (Mn). Se caracterizarán experimentalmente las propiedades estructurales y electrónicas de estos sistemas. Se utilizarán microscopía de efecto túnel (STM) de temperatura variable y difracción de electrones lentos (LEED) para obtener información estructural. Por otro lado, se utilizará espectroscopía de fotoelectrones (XPS: X-ray Photoelectron Spectroscopy y UPS: Ultra-violet Photoelectron Spectroscopy) para determinar la valencia del centro metálico y los estados electrónicos de valencia ocupados. Los resultados experimentales serán interpretados con la ayuda de cálculos teóricos ab-initio basados en la teoría de funcional densidad (DFT).

[1] J.V. Barth, G. Costantini, and K. Kern, *Nature* 437, 671 (2005); J. Barth, *Annu. Rev. Phys. Chem.* 58, 375-407 (2007); J.A.A.W. Elemans, S. Lei, and S. de Feyter, *Angew. Chem. Int. Ed* 48, 7298 (2009).

[2] P. Gambardella, S. Stepanow, A. Dmitriev, J. Honolka, F. M. F. de Groot, M. Lingenfelder, S. Gupta, D. D. Sarma, P. Bencok, S. Stanescu, et al., *Nature Materials* 8, 189 (2009); Abdurakhmanova, T.-C. Tseng, A. Langner, C. S. Kley, V. Sessi, S. Stepanow, and K. Kern, *Phys.Rev. Lett.* 110, 027202 (2013).

## 50. Adsorción de moléculas orgánicas en superficies

**Director:** Esteban A. Sánchez (esanchez@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** División Colisiones Atómicas y Física de Superficies –

**Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Interacción Radiación-Materia – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** El estudio de la interacción de moléculas orgánicas y del crecimiento de estructuras autoensambladas de átomos y moléculas sobre superficies es importante tanto en áreas desarrollo de sensores, en electrónica molecular y producción de materiales nanoestructurados, como en sistemas de impacto ambiental. El estudio de adsorción de moléculas orgánicas en superficies ha recibido mucha atención tanto de la comunidad química como de la física de materiales y de superficies, en particular uno de los temas actuales de estudio en el área de la optoelectrónica, está relacionado con la caracterización del crecimiento y de la estabilidad térmica de películas ultradelgadas semiconductoras de moléculas orgánicas con propiedades ópticas [1,2]; y en el área medioambiental, la necesidad de entender como diferentes especies químicas como los herbicidas se adsorben o disocian al contacto con la superficie de los elementos que componen el suelo [3,4]. En esta tesis se proponen dos líneas de investigación que se desarrollarán según el interés de los alumnos y la disponibilidad de los equipos de laboratorio. Los estudios se realizarán empleando técnicas experimentales de análisis de superficies tales como Microscopía de Efecto Túnel (STM), Difracción de Electrones Lentos (LEED), Difracción de Átomos Rápidos Rasantes (GIFAD), Espectroscopía Auger (AES) y Espectrometría de Iones (TOF-DRS) instaladas en la División Colisiones Atómicas y Física de Superficies del CAB; y los resultados experimentales podrán ser comparados con los estudios teóricos que se realizan actualmente en esta división bajo la supervisión de la Dres. M.L. Martiarena y G. Bocán.

1) Adsorción de PTCDI (perylene-3,4,9,10-tetracarboxidiimide) y EP-PTCDI (N,N'-bis(1-ethylpropyl)-perylene-3,4,9,10-tetracarboxidiimide) en TiO<sub>2</sub>: Nuestro laboratorio ya tiene experiencia en el estudio de la adsorción de EP-PTCDI en superficies de Ag(111) y Cu(100), tanto desde el punto de vista experimental como teórico [5-7], y es nuestra intención extender su estudio a la superficie indicada. En una primera etapa se buscarán preparar superficies atómicamente planas de TiO<sub>2</sub> donde se pueda aplicar la técnica GIFAD, para caracterizar las diferentes fases que se producen en dicha superficie al variar su temperatura. Luego se propone estudiar el proceso de auto-ensamblado y la estabilidad térmica de las moléculas orgánicas.

2) Adsorción de herbicidas en superficies: Se propone estudiar la adsorción de moléculas que vayan aumentando en complejidad, por ejemplo ácido fosfónico

o AMPA, para luego avanzar con el Glifosatos en superficies de metales nobles (Au, Ag y Cu). Estos tipos de experimentos no se realizaron hasta el presente en condiciones de ultra alto vacío, así que en una primera etapa estudiaremos los métodos de deposición desarrollando los instrumentos que sean necesarios para realizar la dosificación in situ. Luego de caracterizar dichos instrumentos, proponemos estudiar la cinética de adsorción y la estabilidad térmica de las moléculas adsorbidas en la superficie. En particular, es importante determinar cómo se adsorben las moléculas más simples y si el Glifosato se disocia durante la adsorción; y cuál es la relación Glifosato/AMPA en superficie. Luego de formada una monocapa se estudiará cómo evoluciona con el aumento de la temperatura del sustrato, buscando determinar si las moléculas adsorbidas se disocian.

- [1] Temirov, R.; Soubatch, S.; Luican, A.; Tautz, F.S. *Nature*, 2006, 444, 350-353.
- [2] Horowitz, G. *Journal of Material Research*, 2004, 19, 1946-1962.
- [3] V. Subramanian and P.E. Hoggard, *J. Agric. Food Chem.*, 36, 1326 (1988).
- [4] A.F. Garcia e M.C. Rollemberg, *Quim. Nova* 30, 1592 (2007); C. F. B. Coutinho e L. H. Mazo, *Quim. Nova* 28, 1038 (2005).
- [5] L.N. Serkovic Loli, J.E. Gayone, M.L. Martiarena, E.A. Sánchez, O. Grizzi, L. Pasquali, B. Doyle, S. Nannarone, H. Hamoudi, C. Dablemont and V.A. Esaulov, *J. Phys. Chem. C* 113, 17866-17875 (2009).
- [6] J.C. Moreno López, O. Grizzi, M.L. Martiarena and E.A. Sánchez, *J. Phys. Chem. C* 117 (22), 11679-11685 (2013).
- [7] Juan C. Moreno-López, Oscar Grizzi and Esteban A. Sánchez, *J. Phys. Chem. C* 120 (35), 19630-19635 (2016).

## 51. Germaneno: un nuevo material 2-D similar al grafeno y al siliceno

**Director:** Oscar Grizzi (grizzi@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Laboratorios de Física de Superficies, División Física de Superficies, Dto. Interacción de la Radiación con la Materia. Gerencia Física, CAB. – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Interacción Radiación-Materia – **Orientación alternativa:** Materia Condensada

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** Motivación y conceptos básicos: El grafeno, descubierto en 2004, es un material formado por carbono puro, con átomos dispuestos en un patrón hexagonal, similar al grafito, pero en una hoja de un sólo átomo de espesor. En 2010 se otorgó el Premio Nobel de Física a Andréy Gueim y a Konstantín Novosiólov por sus investigaciones acerca de este material. Desde su descubrimiento se han propuesto aplicaciones, principalmente en electrónica y baterías, y se han realizado numerosas investigaciones de las propiedades electrónicas, cristalográficas y químicas de este nuevo material bidimensional [1,2]. La búsqueda de otros materiales similares (también bidimensionales) que tengan propiedades específicas, diferentes, llevó a la síntesis de siliceno [3] y más recientemente (2013-2016) de germaneno [4, 5]. Al igual que en la síntesis del siliceno, el método propuesto para fabricar germaneno es el depósito de átomos de germanio sobre un sustrato (oro) cristalino a altas temperaturas y en ultra-alto vacío, utilizando un evaporador tipo Knudsen a muy baja fluencia. Estos primeros trabajos son alentadores porque demuestran que es posible fabricar este material en condiciones de ultra alto vacío, y describen una primera manera de caracterizarlos mediante técnicas de fotoemisión de electrones, microscopía túnel y difracción de electrones lentos. Por otro lado plantean interrogantes interesantes, algunos de los cuales podemos intentar resolver en el Laboratorio de Superficies del CAB. Entre estos: determinar el efecto de variar la temperatura del sustrato, la posibilidad de formar multicapas, el rol del sustrato de oro en la formación de germaneno, la difusión de átomos de oro en la capa de germanio y de germanio en el sustrato de oro, etc. Asimismo, interesa determinar: 1) qué otros sustratos pueden servir para crecer germaneno con las mismas propiedades que el oro (o aún mejores) tal como muestran estudios recientes [6] que sugieren Al(111) como posible sustrato, y 2) que elementos o moléculas podrían adsorberse en la capa de germaneno para variar sus propiedades electrónicas a fin de poder usarlo como semiconductor de una o pocas capas de espesor.

1 <http://grafeno.com/>

2 <http://blogs.discovermagazine.com/crux/2015/07/17/beyond-graphene/#.VkI3DbcvdaQ>

3 <http://www.nature.com/nnano/journal/v10/n3/full/nnano.2014.325.html>

4 <http://nano-bio.ehu.es/germanene-novel-two-dimensional-germanium-allotrope-akin-graphene-and-silicene>. <http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/acs.nanolett.5b00085>.

5 Few layer epitaxial germanene: a novel two-dimensional Dirac material María Eugenia Dávila & Guy Le Lay. [www.nature.com/scientificreports](http://www.nature.com/scientificreports) — 6:20714 — DOI: 10.1038/srep20714

6 Continuous germanene layer on Al(111), *Nanoletters* 2015, 15, 2510. Mickael Derivaz et al.

## 52. Orden magnético y efectos de interacciones en la interfaz de fases magnéticas diferentes en nanopartículas bi-magnéticas magnetita/hematita con estructura ‘core-shell’

**Director:** Roberto D. Zysler (zysler@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Laboratorio Resonancias Magnéticas – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Materia Condensada – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** El conocimiento de las propiedades magnéticas de partículas nanométricas es de gran importancia en la investigación básica y en las aplicaciones tecnológicas (memorias magnéticas de alta densidad, imanes permanentes y biomedicina). El tamaño nanométrico del material actúa sobre el orden estructural y magnético de las nanopartículas, que difiere fuertemente en muchos aspectos del que se observa en los materiales masivos convencionales. Los efectos de superficie dominan las propiedades magnéticas de las partículas más pequeñas ya que se incrementa la proporción de espines en la superficie respecto al número total, para una partícula de  $\sim 3\text{nm}$ , por ejemplo, aproximadamente un 70 % de los átomos se encuentran en la superficie. En el caso de sistemas bi-magnéticos anti-ferromagnético/ferro(ferri-)magnético con una estructura tipo núcleo-cáscara, se observan interesantes y importantes propiedades magnéticas debido a la interacción que ocurre en la interfaz entre un núcleo con un determinado ordenamiento y una cáscara con otro. En esta clase de materiales, de estructura denominada core-shell, quedan muy fuertemente evidenciados los efectos de anisotropía de intercambio, presentando los fenómenos de exchange-bias y exchange-spring, que se reflejan principalmente en alteraciones de los ciclos de histéresis de estos materiales (desplazamiento del ciclo, ensanchamiento-incremento del campo coercitivo, diversas anomalías) Controlando finamente la fabricación de estas nanopartículas, es posible diseñar nuevos materiales artificiales con propiedades magnéticas controladas en función de la morfología del material (composición y tamaño de cada fase) y las características magnéticas de cada sistema separado (anisotropía magnética, magnetización, interacción de intercambio). El plan de trabajo consiste en el estudio de nanopartículas bi-magnéticas (core/shell) de óxidos de hierro de morfología magnetita (core - ferrimagnético)/ hematita (shell-antiferromagnética). Este estudio incluye la síntesis de las partículas por una ruta química, su caracterización morfológica (microscopía y difracción de rayos X) y el estudio de sus propiedades magnéticas por medio de mediciones de magnetización.

### 53. Nonlinealidades y efectos cuánticos en dispositivos optomecánicos semiconductores

**Director:** Alejandro Fainstein (alex.fainstein@gmail.com)

**Lugar de trabajo:** Laboratorio de Fotónica y Optoelectrónica – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Materia Condensada – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** El crecimiento epitaxial de materiales semiconductores, con control al nivel de la capa atómica, permite la concepción y fabricación de dispositivos con propiedades electrónica, ópticas y vibracionales únicas. Esto ha permitido por ejemplo fabricar microcavidades que confinan fotones y se acoplan fuertemente con excitaciones electrónicas de pozos cuánticos, dando lugar a estados cuánticos mixtos (luz-excitón) que son la base de un área de la optoelectrónica llamada ‘electrodinámica cuántica de cavidades’ (CQED). Así mismo, estructuras que confinan y acoplan de manera realimentada a la luz y vibraciones acústicas en resonadores permiten concebir efectos optomecánicos novedosos, por ejemplo el enfriamiento láser hasta el estado cuántico fundamental de osciladores macroscópicos, y la emisión estimulada de sonido. Este campo de enorme actividad actual se ha bautizado como ‘optomecánica de cavidades’. Recientemente hemos demostrado que estructuras semiconductoras basadas en los materiales GaAs/AlAs, que son la base de los láseres de cavidad vertical (VCSELs), son al mismo tiempo excelentes resonadores optoelectrónicos y optomecánicos [1]. Esto ha permitido imaginar nuevas funcionalidades que combinan la electrodinámica cuántica de cavidades, con la optomecánica de cavidades. En particular, nuestros resultados indican que el acoplamiento optomecánico en estos dispositivos podría ser varios miles de veces más grande que en los resonadores descritos en el pasado [2,3], pudiendo quizás permitir enfriamiento láser incluso a la escala de fotones únicos. Así mismo, la operación a frecuencias de vibración dos órdenes de magnitud mayores que otros sistemas optomecánicos debería permitir acceder al estado cuántico fundamental a temperaturas mucho mayores [4].

En el marco de este trabajo de tesis buscaremos evidenciar los efectos optomecánicos descritos, el enfriamiento y emisión estimulada de fonones, y no-linealidades optomecánicas, en microresonadores de GaAs/AlAs con acoplamiento fuerte luz-excitón. El estudiante se verá involucrado en el diseño y modelado de las estructuras, en experimentos de espectroscopía Raman de ultra-alta resolución, y de dinámica ultrarrápida basada en láseres de femto y picosegundos, así como en el modelado teórico de los mismos.

[1] Strong Optical-Mechanical Coupling in a Vertical GaAs/AlAs Microcavity for Subterahertz Phonons and Near-infrared Light, A. Fainstein, N. D. Lanzillotti-

Kimura, B. Jusserand, and B. Perrin, Phys. Rev. Lett. 110, 037403 (2013).

[2] Polariton path to fully resonant dispersive coupling in optomechanical resonators, G. Rozas, A. E. Bruchhausen, A. Fainstein, B. Jusserand, and A. Lemaitre, Physical Review B 90, 201302(R) (2014).

[3] Polariton resonances for ultra-strong coupling cavity optomechanics in GaAs/AlAs multiple quantum wells, B.Jusserand, A. Poddubny, A. Poshakinskiy, A. Fainstein, and A. Lemaitre, Phys. Rev. Letters 115, 267402 (2015).

[4] Micropillar resonators for optomechanics in the extremely high 20-100 GHz frequency Range, S. Anguiano, A. E. Bruchhausen, B. Jusserand, I. Favero, F. R. Lamberti, L. Lanco, I. Sagnes, A. Lemaitre, N. D. Lanzillotti-Kimura, P. Senellart, and A. Fainstein, arXiv:1610.04179 (2016), enviado a Phys. Rev. Letters.

## 54. Simulaciones cuánticas: Monitoreo de sistemas cuánticos de muchos cuerpos fuera de equilibrio

**Director:** Gonzalo A. Alvarez (gonzalo.alvarez@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Laboratorio de Espectroscopia e Imágenes por Resonancia Magnética Nuclear - Departamento de Física Médica - Centro Atómico Bariloche  
– **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Materia Condensada – **Orientación alternativa:** Sistemas Complejos

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** Teórico

### Descripción:

Aclaración: Según tu interés y vocación, este trabajo se puede desarrollar en un marco teórico y/o experimental!

La complejidad de sistemas cuánticos de muchos cuerpos es un problema de gran antigüedad en la física, y son de gran importancia en muchas ramas de la ciencia como en materia condensada, química cuántica, átomos fríos y de particular interés para el estudio de proteínas o moléculas muy grandes. Los procesos dinámicos en estos sistemas complejos, puede considerarse muchas veces como procesos de ‘difusión cuántica’ donde uno puede observar efectos de localización, termalización e irreversibilidad de la dinámica cuántica y como estos efectos se encuentran correlacionados entre si.

Ciertos estados cuánticos de estos sistemas pueden estar localizados en posiciones bien definidas del espacio o pueden estar delocalizados, dependiendo de parámetros como el desorden del sistema o los tipos de interacciones presentes. En el régimen en que se encuentran localizados, estos sistemas pueden no alcanzar un estado de equilibrio térmico reteniendo información acerca de su estado inicial a escalas de tiempo muy largas. Este fenómeno, que está ligado a lo que se llama la ‘localización de muchos cuerpos’ (many-body localization), puede ser muy relevante para guardar información cuántica en estos estados. El rol de la topología y la dimensión del sistema, el tipo de interacciones que pueden ser de corto o largo alcance, y la presencia de desorden es muy importante para el surgimiento de estos regímenes de localización y puede servir como una herramienta de caracterización.

La dimensión del espacio de Hilbert crece exponencialmente con el tamaño del sistema dificultando su tratamiento numérico y teórico de forma generalizada para predecir el surgimiento de estos fenómenos. Es muy importante entonces lograr este tipo de control experimentalmente en sistemas de muchos cuerpos, y más aún en tres dimensiones, con el fin de hacer simulaciones cuánticas. Si bien gracias al avance en el control cuántico un gran progreso se ha adquirido a nivel

experimental, todavía es un problema muy desafiante dada su gran complejidad.

En esta tesis se buscarán diferentes situaciones experimentales y/o modelarán con simulaciones computacionales, dependiendo el interés del estudiantes, para desarrollar nuevos métodos y técnicas para controlar y observar la dinámica cuántica de muchos cuerpos. El objetivo es desarrollar nuevas estrategias para estudiar la física de estos sistemas. Se utilizarán técnicas de Resonancia Magnética Nuclear con la que se puede controlar sistemas de espines interactuantes generando simulaciones cuánticas para modelar y entender la dinámica de estos sistemas complejos [1-6]. Las técnicas principales que se desarrollarán con este fin se basarán en el monitoreo del número de espines que participan en la dinámica cuántica [1-3;6] y de los efectos de decoherencia cuántica en dichas dinámicas [1,3, 7-8].

- 1 G. A. Alvarez and D. Suter, *Phys. Rev. Lett.* 104, 230403 (2010).
- 2 G. A. Alvarez, D. Suter, and R. Kaiser, *Science* 349, 846 (2015).
- 3 G. A. Alvarez and D. Suter, *Phys. Rev. A* 84, 012320 (2011).
- 4 G. A. Alvarez, C. O. Bretschneider, R. Fischer, P. London, H. Kanda, S. Onoda, J. Isoya, D. Gershoni, and L. Frydman, *Nat. Commun.* 6, 8456 (2015).
- 5 G. A. Alvarez and D. Suter, *Phys. Rev. Lett.* 107, 230501 (2011).
- 6 G. A. Alvarez, R. Kaiser, and D. Suter, *Ann. Phys. (Berlin)* 525, 833 (2013).
- 7 G. A. Alvarez, E. P. Danieli, P. R. Levstein, and H. M. Pastawski, *J. Chem. Phys.* 124, 194507 (2006); *Phys. Rev. A* 82, 012310 (2010).
- 8 C. O. Bretschneider, G. A. Alvarez, G. Kurizki, and L. Frydman, *Phys. Rev. Lett.* 108, 140403 (2012).

## 55. Optimizando sensores cuánticos por resonancia magnética nuclear para caracterizar procesos físicos, químicos, biológicos y de interés en medicina

**Director:** Gonzalo A. Alvarez (gonzalo.alvarez@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Laboratorio de Espectroscopia e Imágenes por Resonancia Magnética Nuclear - Departamento de Física Médica - Centro Atómico Bariloche  
– **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Materia Condensada – **Orientación alternativa:** Física en Medicina y Biología

**Metodología principal:** Teórico – **Metodología secundaria:** Experimental

### **Descripción:**

Aclaración: Según tu interés y vocación, este trabajo se puede desarrollar en un marco teórico y/o experimental!

El desarrollo de tecnologías cuánticas es un campo de gran crecimiento e importancia actual. Propiedades específicas de sistemas cuánticos son explotadas para mejorar el desempeño de numerosas aplicaciones que requieren la transmisión, el proceso y/o monitoreo de la información cuántica. Estas tecnologías sirven por ejemplo para simular sistemas cuánticos, para hacer cálculos complejos de forma más rápida que con las computadoras clásicas convencionales o para usarlos como sensores a escalas moleculares, nanométricas y micrométricas con fuertes aplicaciones en el ámbito físico, químico, biológico y médico. El gran desafío a afrontar para el desarrollo de estas nuevas tecnologías, es que los sistemas cuánticos son muy sensibles al medioambiente con el cual inevitablemente interactúan [1]. Estas interacciones degradan las propiedades cuánticas indispensables para estas nuevas tecnologías, como las coherencias o el entrelazamiento cuántico. Sin embargo, esta misma interacción con el ambiente puede ser utilizada como una herramienta si es controlada de forma adecuada tanto para el monitoreo del ambiente [2-4] o como proceso de control para hacerlo más robusto o eficiente [5-6]. Es entonces esencial controlar la interacción entre el dispositivo y su medio ambiente, para suprimir los efectos indeseados del ambiente, mientras que la interacción necesaria para que los dispositivos funcionen de la forma deseada se mantenga.

Con esta tesis se contribuirá al desarrollo de nuevas tecnologías cuánticas y aplicaciones en física, química, biofísica y medicina basadas en espectroscopia e imágenes por resonancia magnética nuclear a través de la explotación y desarrollos de conceptos fundamentales de la mecánica cuántica. Se combinarán técnicas de control cuántico en resonancia magnética con herramientas de teoría de la información cuántica [4,7], para desarrollar métodos para utilizar espines nucleares o electrónicos como sensores cuánticos para caracterizar su entorno a

escalas moleculares, nanométricas y micrométricas [2-5,7-12]. El objetivo principal es extraer y controlar información de utilidad para monitorear una gran variedad de procesos a estas escalas que tanto en el corto, como en el largo plazo produzcan nuevos métodos no invasivos para el diagnóstico y estudio de enfermedades y de procesos biológicos en animales y seres humanos. Sensores cuánticos en estos casos pueden ser los espines nucleares de moléculas intrínsecas a sistemas biológicos (ej. protones del agua), o dispositivos nanométricos que son inyectados o puestos en contacto con sistemas biológicos.

- 1 D. Suter and G.A. Alvarez. *Rev. Mod. Phys.* 88, 041001 (2016).
- 2 G. A. Alvarez and D. Suter, *Phys. Rev. Lett.* 107, 230501 (2011).
- 3 G. A. Alvarez, N. Shemesh, and L. Frydman, *Phys. Rev. Lett.* 111, 080404 (2013).
- 4 A. Zwick, G. A. Alvarez, and G. Kurizki, *Phys. Rev. Applied* 5, 014007 (2016).
- 5 C. O. Bretschneider, G. A. Alvarez, G. Kurizki, and L. Frydman, *Phys. Rev. Lett.* 108, 140403 (2012).
- 6 G. A. Alvarez, C. O. Bretschneider, R. Fischer, P. London, H. Kanda, S. Onoda, J. Isoya, D. Gershoni, and L. Frydman, *Nat. Commun.* 6, 8456 (2015).
- 7 A. Zwick, G. A. Alvarez, and Gershon Kurizki. *Phys. Rev. A* 94, 042122 (2016).
- 8 N. Shemesh, G. A. Alvarez, and L. Frydman, *J. Magn. Reson.* 237, 49 (2013).
- 9 G. A. Alvarez, N. Shemesh, and L. Frydman, *J. Chem. Phys.* 140, 084205 (2014).
- 10 N. Shemesh, G. A. Alvarez, and L. Frydman, *PLoS ONE* 10, e0133201 (2015).
- 11 G. A. Alvarez and D. Suter, *Phys. Rev. Lett.* 104, 230403 (2010).
- 12 G. A. Alvarez, D. Suter, and R. Kaiser, *Science* 349, 846 (2015).

## 56. Propiedades electrónicas del semi-metal $WTe_2$

**Director:** Víctor Félix Correa (victor.correa@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Grupo de Bajas Temperaturas – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Materia Condensada – **Orientación alternativa:** Ciencia de Materiales

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** Se conoce como magnetorresistencia gigante al efecto observado en diversos compuestos en los cuales la resistividad eléctrica  $\rho$  cambia algunos órdenes de magnitud en presencia de un campo magnético externo. Un ejemplo paradigmático lo constituyen los óxidos de manganeso conocidos como manganitas donde un campo moderado de algunos Tesla puede producir un cambio de  $\rho$  de hasta  $10^9$  %, efecto conocido como magnetorresistencia colosal. Una característica común de todos estos sistemas es que se trata de muy malos conductores eléctricos (cuasi-aislantes) donde el campo magnético produce una magnetorresistencia negativa (mejoran su metalicidad).

Recientemente se observó por primera vez una magnetorresistencia colosal positiva ( $10^7$  %) en el dicalcogenuro semimetálico  $WTe_2$ . La resistividad tiene una dependencia cuadrática con el campo magnético hasta 60 Tesla, sin ningún indicio de saturación. Esta observación apunta hacia un metal casi perfectamente compensado donde la densidad de portadores positivos p (huecos) equipara a la densidad de portadores negativos n (electrones):  $p/n \approx 0.998$ .

El plan de trabajo propone crecer muestras monocristalinas de  $WTe_2$  a través del método de autoflujo y el estudio de las propiedades electrónicas de este sistema principalmente a través del efecto de Haas van Alphen (dHvA). El estudio de estas oscilaciones periódicas de la magnetización M con el campo magnético permitirá extraer información sobre la forma de la superficie de Fermi y las masas efectivas de los portadores, entre otras propiedades. Para medir M se empleará un magnetómetro de torque. El estudio del efecto dHvA supone el empleo conjunto de campos magnéticos elevados ( $> 10$  Tesla) y bajas temperaturas ( $< Kelvin$ ). Por esto, los experimentos se realizarán en un imán superconductor de 18 Tesla. Por otro lado, resulta casi imprescindible el uso de un crióstato de dilución. Ambas facilidades se encuentran disponibles en el laboratorio de Bajas Temperaturas del CAB.

## 57. Diseño y caracterización de láseres de cascada cuántica en el infrarrojo medio

**Director:** Guillermo Rozas (grozas@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Laboratorio de Fotónica y Optoelectrónica, Dpto. de Materia Condensada, Gerencia de Física – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Materia Condensada – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Computacional – **Metodología secundaria:** Experimental

**Descripción:** Un láser de cascada cuántica (QCL) es una fuente láser de estado sólido monolítica basada en transiciones electrónicas inter-sub-banda en heteroestructuras semiconductoras. En contraste con un láser semiconductor convencional, en donde la luz es generada por la recombinación de electrones de la banda de conducción y huecos de la banda de valencia (con una energía del orden del gap de energía del material), la luz en un QCL es producida por la transición de electrones de una sub-banda de conducción confinada a otra en un sistema de pozos cuánticos acoplados, permitiendo controlar por diseño la energía de emisión. En principio, la energía a la cual emite un QCL puede hacerse arbitrariamente baja reduciendo la separación entre las sub-bandas de conducción confinadas en los pozos cuánticos, haciendo de los QCLs muy buenos candidatos para láseres en el infrarrojo medio y lejano ( $\lambda > 3\mu\text{m}$ ).

Para que un QCL emita luz, y lo haga de forma eficiente, deben conjugarse correctamente aspectos tanto del diseño como de la fabricación de la estructura semiconductor. Este trabajo estará focalizado principalmente en la etapa de diseño, con una fuerte componente teórica y computacional en las áreas de materia condensada y electromagnetismo. La unidad emisora básica de un QCL está formada por una etapa de inyección, una región activa (que emite la luz), y una etapa de colección. Esta unidad básica se repite periódicamente de forma tal que, al aplicar un potencial externo, la energía de la etapa de colección de una unidad coincide con la de inyección de la siguiente, permitiendo el transporte de electrones a lo largo de la ‘superred’. A fin de generar la inversión de población entre las dos sub-bandas láser dentro de cada región activa, un QCL requiere de una cuidadosa ingeniería de los tiempos de vida, los estados intermedios de conexión, y las probabilidades de túnel entre las unidades emisoras. En vista de los numerosos parámetros implicados y del balance preciso necesario para su funcionamiento, simulaciones rápidas y precisas de las propiedades electrónicas, ópticas y de transporte de las estructuras juegan un papel importante en su diseño. El alumno participará del desarrollo de los algoritmos de cálculo necesarios y de su implementación en códigos computacionales, además de realizar caracterizaciones experimentales ópticas y electrónicas de las estructuras crecidas a fin de retroalimentar los cálculos. Existirá, además, una fuerte interacción con el grupo del CAB encargado del crecimiento y procesamiento de las mismas.

Este trabajo está enmarcado dentro de un proyecto global de CNEA en el área de separación isotópica por láser, con el objetivo puntual de producir de fuentes de luz QCL para caracterización en el rango  $8 - 20\mu\text{m}$ . Si bien en partes de ese rango existen láseres comerciales, ciertas longitudes de onda de interés no están disponibles. Por otro lado, siendo una tecnología estratégica, sería ideal que el desarrollo de los mismos sea realizado dentro del país. El alumno se insertará en el grupo que está iniciando este trabajo, permitiéndole participar de un área de desarrollo estratégico de CNEA desde sus comienzos.

## 58. Acoplamiento entre un gas de electrones bidimensional y una red de vórtices en movimiento

**Director:** César R. Proetto (proetto@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Teoría de la materia condensada – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Materia Condensada – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Teórico – **Metodología secundaria:** Computacional

**Descripción:** Se propone aquí el estudio teórico de un sistema híbrido superconductor - semiconductor heteroestructurado, ambos ubicados en una disposición geométrica bidimensional o laminar (plano x-y). En presencia de un campo magnético en la dirección perpendicular (según z), y si el superconductor es del tipo II, el campo magnético penetrará en el mismo en la forma de un arreglo periódico bidimensional de vórtices, o red de Abrikosov. Si el gas de electrones bidimensional que se forma en la interfaz de dos semiconductores tales como AsGa -  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  se encuentra en las cercanías del superconductor, los vórtices penetrarán también el plano donde se encuentran los electrones (usualmente denominado 2DEG), dando lugar a un acoplamiento superconductor - 2DEG. Desde el punto de vista de la red de Abrikosov, este acoplamiento da origen a un término de amortiguamiento o fricción que se opone a su movimiento. Desde el punto de vista del 2DEG, los electrones están sometidos a un campo magnético inhomogéneo y dinámico. Se intentará atacar este problema teóricamente resolviendo (posiblemente numéricamente) una ecuación de Schrodinger dependiente del tiempo, empleando técnicas de cálculo relacionadas con el teorema de Floquet. Para ello, se empleará a modo de chequeo el hecho de que existen soluciones analíticas para este mismo problema en el límite de campos magnéticos bajos (vórtices aislados, equivalente a un problema de Aharonov-Bohm) y en el límite de campos magnéticos altos (vórtices superpuestos, equivalente al efecto Hall cuántico). Con el conocimiento teórico logrado, se intentará además colaborar con la interpretación teórica de experimentos relacionados, a desarrollar en la nueva facilidad experimental con que cuenta el Centro Atómico Bariloche para el crecimiento epitaxial de muestras metálicas - semiconductoras (equipo MBE ubicado en la nueva Sala Limpia), diseñadas con la finalidad de obtener evidencia experimental novedosa sobre el acoplamiento superconductor-2DEG descripto más arriba.

## 59. Orden orbital y magnético en $\text{Sr}_2\text{CrO}_4$

**Director:** Pablo S. Cornaglia (pablo.cornaglia@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Grupo de Teoría de la Materia Condensada – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Materia Condensada – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Teórico – **Metodología secundaria:** Computacional

**Descripción:** En los últimos años el director de la propuesta ha desarrollado, junto con un estudiante doctoral y otros colaboradores, una técnica para el estudio de materiales fuertemente correlacionados de manera realista. Dicha técnica se enmarca en extensiones de la Teoría de Funcional Densidad (DFT) utilizando la Teoría de Campo Medio Dinámico (DMFT). La conjunción de DFT y DMFT toma como punto de partida la estructura electrónica calculada desde primeros principios utilizando DFT dentro de las aproximaciones locales usuales y evalúa efectos de correlaciones fuertes utilizando DMFT. La implementación de la técnica de bosones esclavos invariantes de rotación (RISB) para la resolución de problemas de impureza cuántica asociados a DMFT permite agilizar sensiblemente los cálculos numéricos y simplificar la interpretación de los resultados [1-3].

El codirector de la propuesta (Dr. Aligia) ha colaborado con un grupo experimental de Grenoble en apoyo teórico en una serie de fenómenos con orden orbital y magnético observado en sistemas de metales de transición [4-7]. En particular los experimentales están estudiando diversos compuestos de la estructura perovskita del tipo  $\text{Sr}_{n+1}\text{Cr}_n\text{O}_{3n+1}$ . Recientemente se ha derivado, como fruto de dicha colaboración, un hamiltoniano efectivo que incluye grados de libertad de espín y de pseudoespín para describir el orden orbital y de espín del compuesto con  $n=2$  que es aislante. Ahí se observa un cambio de entropía  $R \ln(6)$  en la transición observada en el orden magnético, que corresponde al ordenamiento simultáneo de un triplete de espín y un doblete orbital, lo que corresponde a 6 grados de libertad.

El compuesto con  $n=1$  ha sido medido [7,8] pero la interpretación teórica es más complicada. El sistema es metálico y aparentemente el orden orbital y magnético suceden a diferentes temperaturas. También la entropía de la transición es muy chica lo que implica que los momentos orbitales o magnéticos son pequeños. El sistema estaría en el medio entre orden magnético y orbital localizado o itinerante, lo cual es muy difícil de tratar y un hamiltoniano efectivo como el usado para  $n=2$  no es válido.

Proponemos tratar el compuesto con  $n=1$  de la serie con LDA + DMFT utilizando la técnica RISB resolver las ecuaciones de DMFT. El objetivo es analizar

el orden magnético y/o orbital en dicho compuesto. Para ello:

- 1) Se realizarán cálculos de primeros principios para obtener la estructura electrónica de dicho compuesto
- 2) Se identificarán los orbitales fuertemente correlacionados y se construirán orbitales de Wannier asociados a los mismos para construir el problema efectivo a ser tratados con DMFT.
- 3) Se realizarán cálculos de DMFT utilizando RISB explorando la posibilidad de orden magnético y orbital a baja temperatura.

Referencias:

- [1] On the nature of the Mott transition in multiorbital systems, JI Facio, V Vildosola, DJ García, PS Cornaglia, *Physical Review B* 95 (8), 085119 (2017)
- [2] Pseudogap opening and formation of Fermi arcs as an orbital-selective Mott transition in momentum space, M Ferrero, PS Cornaglia, L De Leo, O Parcollet, G Kotliar, A Georges, *Physical Review B* 80 (6), 064501
- [3] J. I. Facio et al., (en preparación)
- [4] Antiferromagnetism and Ferromagnetism in Layered 1T CrSe<sub>2</sub> with V and Ti replacements, D. C. Freitas, M. Núñez, P. Strobel, A. Sulpice, R. Weht, A. A. Aligia, and M. Núñez Regueiro, *Phys. Rev. B* 87, 014420 (2013).
- [5] Orbital Kondo effect in V-doped 1T CrSe<sub>2</sub>, M. Núñez, D. C. Freitas, F. Gay, J. Marcus, P. Strobel, A. A. Aligia, and M. Núñez-Regueiro, *Phys. Rev. B* 88, 245129 (2013).
- [6] Orbital Peierls state in bilayer Sr<sub>3</sub>Cr<sub>2</sub>O<sub>7</sub>, Justin Jeanneau, Pierre Toulemonde, Gyorgy Remenyi, André Sulpice, Claire Colin, Vivian Nassif, Emmanuelle Suard, Eduardo Salas Colera, Germán R. Castro, Frederic Gay, Corina Urdaniz, Ruben Weht, Clement Fevrier, Arnaud Ralko, Claudine Lacroix, Armando A. Aligia, and Manuel Núñez-Regueiro. Enviado a *Phys. Rev. Lett.*
- [7] Reversed Crystal-Field Splitting and Spin-Orbital Ordering in Sr<sub>2</sub>CrO<sub>4</sub>, Takashi Ishikawa, Tatsuya Toriyama, Takehisa Konishi, Hiroya Sakurai, and Yukinori Ohta, *Journal of the Physical Society of Japan* 86, 033701 (2017).
- [8] J. Jeanneau et al., en preparación

## 60. Superredes de calcogenuros superconductores

**Director:** Julio Guimpel (jguimpel@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** División Bajas Temperaturas – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Materia Condensada – **Orientación alternativa:** Ciencia de Materiales

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** Las superredes son estructuras artificiales en las cuales films de dos materiales son depositados alternadamente uno sobre el otro. De esta manera pueden existir efectos de proximidad, donde los electrones de ambos materiales pasan al otro ‘transfiriendo’ las propiedades hasta que sufran un choque y su función de onda pierda coherencia. Por ejemplo, si un material es superconductor y el otro magnético, cerca de la interfase el material magnético será ligeramente superconductor y el superconductor ligeramente magnético. Por otro lado, el ‘desorden’ en la interfase, sea por interdifusión o por rugosidad afectará este intercambio modificando también las propiedades [I. K. Schuller, J. Guimpel and Y. Bruynseraede, ‘Artificially Layered Superconductors’, Bull. Mat. Res. Soc., February, 1990, 29.]. El descubrimiento de superconductividad en los cupratos tipo perovskita [J. G. Bednorz and K. A. Müller, Zeitschrift für Physik B Condensed Matter 64, 189 (1986)] trajo aparejado una revolución en este campo de la física de la materia condensada. Desde ese entonces se han seguido buscando materiales que presenten superconductividad a mayores temperaturas. En 2008 se encontró superconductividad en calcogenuros [T. Park et al., J. Phys.: Condens. Matter 20, 322204 (2008)]. El compuesto FeSe, en particular, presenta una  $T_c$  del orden de 10K. Un resultado experimental que llamó poderosamente la atención es que, al crecerlo en forma de film delgado con un espesor de 1 celda unidad encima de un sustrato de Titanato de Estroncio la  $T_c$  aumenta por encima de 100K [Jian-Feng Ge et al, Nature Materials 14, 285 (2015)]. En esta propuesta de Tesis de Maestría se propone el crecimiento de superredes de FeSe con otros compuestos y el estudio de sus propiedades estructurales y físicas. La motivación principal es estudiar como la existencia de las interfaces entre los materiales pueden afectar sus propiedades físicas. Las superredes se crecerán por el método de sputtering. La estructura se estudiará a nivel macroscópico por difracción de RX, y a nivel microscópico por microscopía electrónica. En cuanto a las propiedades físicas se medirán transporte eléctrico en función de temperatura y campo magnético. También se caracterizará la respuesta magnética por medio de magnetización y susceptibilidad alterna, también en función de temperatura y campo magnético.

## 61. Nanoestructuras superconductoras con desorden

**Director:** Julio Guimpel (jguimpel@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** División Bajas Temperaturas – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Materia Condensada – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** Las propiedades de un sistema en materia condensada están definidas en gran medida por la periodicidad y la simetría del mismo. Por ello el desorden inherente a un sistema real juega un papel preponderante en la física que se estudia, aunque en algunos casos puede ser más permisivo, como en la interacción entre vórtices superconductores y defectos, donde la distancia involucrada (longitud de coherencia) es relativamente larga.

Actualmente se pueden fabricar estructuras nanométricas utilizando técnicas litográficas ó de haz iónico enfocado. Esto ha abierto campos de investigación nuevos como las redes periódicas de defectos en superconductores [A. Hoffmann, P. Prieto, Ivan K. Schuller, Phys Rev B 61, 6958 (2000)]. La idea detrás de una red periódica de centros de anclaje es relativamente simple, se genera una red de puntos magnéticos submicrométricos que debilitan las propiedades superconductoras del film localmente generando un potencial atractivo para los vórtices, en lugares predeterminados y con geometría controlada. Esto ha permitido la observación de efectos novedosos e interesantes. como la commensuración de la red de vórtices con la red de centros de anclaje o avalanchas en el movimiento de vórtices [J.I. Facio, A.Abate, J.Guimpel and P.S.Cornaglia, J. Phys.: Cond. Matt., 25, 245701 (2013)]. Sorprendentemente, un parámetro que ha sido poco estudiado es el efecto del desorden en la red de defectos y su influencia sobre los efectos de commensurabilidad [Y.J.Rosen, A.Sharoni and Ivan K. Schuller, Phys.Rev.B 82, 14509 (2010)].

El objetivo de este plan de maestría es el estudio de la respuesta magnética en films superconductores con redes de defectos desordenadas. La fabricación de defectos utilizara una técnica poco convencional que combina membranas porosas de óxido de aluminio y crecimiento por sputtering y electroquímico. La morfología de los poros (tamaño y orden) en la membrana se pueden controlar con mucha precisión. Pegándolas al sustrato se pueden usar como mascara para la fabricación de puntos magnéticos (centros de anclaje) o columnas superconductoras (centros repulsivos).

Las muestras se fabricarán en colaboración con el Prof. C. Montón en University of Texas at San Antonio, quien es experto en el crecimiento de las membranas nano porosas. Los films y puntos se crecerán por el método de sputtering utilizando las facilidades existentes en las instalaciones de la Sala Limpia del CAB.

En cuanto a las propiedades físicas se utilizarán los equipos de medición disponibles en el laboratorio de Bajas Temperaturas. Se medirá transporte eléctrico en función de temperatura y campo magnético, y se caracterizará la respuesta magnética por medio de magnetización y susceptibilidad alterna, también en función de temperatura y campo magnético.

## 62. Física Estadística de paredes de dominio magnéticas

**Director:** Sebastian Bustingorry (sbusting@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Teoría de la Materia Condensada – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Materia Condensada – **Orientación alternativa:** Sistemas Complejos

**Metodología principal:** Computacional – **Metodología secundaria:** Experimental

**Descripción:** Los materiales ferromagnéticos se caracterizan por presentar una fase paramagnética (desordenada) a alta temperatura y una fase ferromagnética (ordenada) por debajo de la temperatura de Curie. En su versión más simple, cuando el material tiene una simetría tipo Ising, la fase ferromagnética tiene dos estados posibles en los que los momentos magnéticos apuntan en una dirección [(+) o hacia arriba] o en la dirección opuesta [(-) o hacia abajo]. Esto da lugar a la posibilidad de coexistencia de dominios con orientaciones magnéticas opuestas; a la región del material que separa éstos dominios se la denomina pared de dominio.

La formación, estabilidad y dinámica de los dominios y las paredes de dominio son cruciales en los procesos de inversión de la magnetización y entonces comprender sus propiedades es tanto de interés fundamental como aplicado. Por ejemplo, el control de la formación (escritura y borrado) y estabilidad de dominios magnéticos es fundamental en el desarrollo de memorias magnéticas a escalas cada vez más pequeñas.

En ausencia de desorden es de esperar que la pared de dominio tome una configuración plana; como una línea recta que separa los dominios magnéticos con magnetización opuesta. Sin embargo, debido a la presencia inevitable de desorden en los materiales, la pared de dominio presenta fluctuaciones en su posición que hacen que se observe como una línea rugosa. La caracterización de la rugosidad de las paredes de dominio es importante pues contiene información clave sobre las contribuciones energéticas relevantes.

En este trabajo proponemos desarrollar métodos numéricos que permitan caracterizar las fluctuaciones de paredes de dominio desde el marco de la Física Estadística. Esto posibilitará el análisis tanto de simulaciones numéricas de modelos simples como de resultados experimentales. Para cumplir con el objetivo propuesto se desarrollarán códigos numéricos propios y se utilizarán técnicas de análisis de imágenes. Se espera también poder generar una fuerte interacción con grupos experimentales del CAB en los cuales es posible obtener imágenes de paredes de dominio en películas magnéticas delgadas.

Siendo esta una propuesta enmarcada en el contexto de aplicaciones de la Física Estadística a la Materia Condensada, para desarrollar el tipo de trabajo detallado en este plan, se deberán incorporar contenidos de la física estadística y termodinámica de transiciones de fase, dinámica de sistemas complejos, teoría del estado sólido y magnetismo de la materia condensada, entre otros.

### **63. Sensores de fotones superconductores MKIDs para futuros mapeos de la estructura de gran escala en el Universo**

**Director:** Mariano Gomez Berisso (berisso@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Fermi National Accelerator Laboratory, USA – **Lugar de trabajo alternativo:** Laboratorio Bajas Temperaturas, Argentina

**Orientación:** Materia Condensada – **Orientación alternativa:** Partículas y Campos

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** Durante la década de los 2020s el proyecto Large Synoptic Survey Telescope (LSST) va a mapear 3.000.000.000 de galaxias para el estudio de la estructura de gran escala en el universo. Este mapa fotométrico va a ser fundamentalmente bi-dimensional, sin una medición precisa del corrimiento al rojo de cada galaxia. El seguimiento espectroscópico de estas observaciones se vuelve prohibitivo con la tecnología existente. Los sensores superconductores MKIDs han sido identificados como una alternativa para superar esta limitación en futuros instrumentos astronómicos. El trabajo propuesto acá consiste en estudiar sensores MKIDs para entender sus limitaciones y optimizar su funcionamiento como detectores de fotones en el rango visible e infrarrojo cercano. Los sensores prototipos serán producidos en los laboratorios de nano-fabricación de U.Chicago y Argonne National Laboratory y caracterizados en Fermi National Accelerator Laboratory.

## 64. Propiedades magnéticas y de transporte de calcogenuros de metales de transición superconductores

**Director:** Gladys Nieva (gnieva@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Laboratorio de Bajas Temperaturas del Centro Atómico Bariloche – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Materia Condensada – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** -

**Descripción:** Los calcogenuros de metales de transición (MT-Ch con MT=Cr, Fe, Co y Ch=S, Se, Te) son materiales atractivos tanto desde el punto de vista básico, por los fenómenos microscópicos que describen sus propiedades, como desde el punto de vista de sus potenciales aplicaciones. Los diagramas de fase de los calcogenuros basados en metales de transición tienen una amplia variedad de compuestos y soluciones sólidas con estructuras metaestables. Estos diagramas juegan un rol primario en el entendimiento de las propiedades de estos materiales. Para los superconductores basados en Fe (Fe-Ch) la definición correcta de su diagrama de fases es crucial debido al juego entre la cristaloquímica y sus propiedades magnéticas por un lado y por otro a la posible coexistencia de superconductividad y magnetismo.[1] Es de gran importancia en los superconductores basados en Fe la descripción correcta de la región donde hay un cambio de régimen entre un estado fundamental magnético y uno superconductor. En muchos de estos sistemas, hay una transición estructural cuyo origen es netamente electrónico.[2] Las propiedades físicas y en particular las propiedades en el estado superconductor, además pueden depender fuertemente de la ocurrencia de características microestructurales locales como microtensiones, fluctuaciones químicas, bordes de grano, defectos, paredes de dominio.[3, 4] El diagrama de fases Fe-Ch ha recibido especial interés en los últimos años por el descubrimiento del superconductor[5] FeSe (fase teragonal que se sintetiza a bajas temperaturas). El FeSe y las sustituciones Fe(S<sub>1-x</sub>Tex)[6] y Fe(Se<sub>1-x</sub>Tex)[7] son superconductoras debajo de 15K aunque su temperatura crítica aumenta con presión hidrostática aplicada. Una de las preguntas más relevantes en relación a estos calcogenuros de Fe es el rol del magnetismo como mediador de la interacción atractiva que induce la formación de pares superconductores. Además el descubrimiento de un compuesto con capas intercaladas de metales alcalinos en FeSe, es decir AxFe<sub>2</sub>-ySe<sub>2</sub> con A=K, Rb, Cs, Tl con temperatura crítica superconductoras T<sub>c</sub>~30K [8-11] ha estimulado aún más el estudio de este peculiar superconductor. En monocristales de AxFe<sub>2</sub>-ySe<sub>2</sub> es conocido que ocurre separación de fases con diferentes estequiometrias y propiedades físicas, hasta el momento aún se debate la superconductividad intrínseca, y la estequiometría de estos compuestos. Es posible que los problemas de separación de fases que se reportan pudieran ser enfrentados usando tratamientos térmicos de bajas temperatura de manera similar a lo que reportamos en el sistema FeSe.[12]

En los superconductores basados en Fe, la emergencia de estados electrónicos nemáticos [13] es acompañada por una transición de fase estructural. Esto es estudiado principalmente en el compuesto FeSe con una transición estructural alrededor de los 90K que se correlaciona con importantes cambios en la superficie de Fermi. Hemos estudiado en nuestro grupo la correlación con propiedades de transporte en altos campos magnéticos [14, 15]. Estos estados electrónicos nemáticos van desapareciendo con el dopaje, en particular el dopaje con Te o S en el sitio del Selenio baja la temperatura de la transición estructural y para dopajes críticos la hace desaparecer (aunque el compuesto sigue siendo superconductor). Esto también ocurre en el caso del dopaje de Co en el sitio del Fe donde la superconductividad y la transición estructural desaparecen para muy bajos niveles de dopaje.[16]

Es esencial para un estudio de propiedades intrínsecas contar con materiales monocristalinos. La síntesis de los calcogenuros basados en Fe es complicada por los desafíos que ofrece la variedad de fases que forman, sin embargo en nuestro grupo fuimos exitosos en el crecimiento de cristales a bajas temperaturas sin mezcla de fases. Se lograron sintetizar cristales de FeSe, FeSe<sub>1-x</sub>Tex y FeSe<sub>1-x</sub>Sx y caracterizarlos con distintas técnicas experimentales, accesibles en el laboratorio de BT y en otros laboratorios del CAB.

Este plan de trabajo propone el estudio de propiedades de transporte eléctrico en altos campos magnéticos y propiedades magnéticas de Calcogenuros Fe. El trabajo se focalizará en una primera etapa en la producción de materiales monocristalinos sintetizados por técnicas de transporte en fase vapor de compuestos de FeSe dopado con Te y S en el sitio del Se y con Cr en el sitio del Fe. Se estudiarán las propiedades magnéticas, su relación con la estructura cristalina y propiedades de transporte eléctrico en altos campos magnéticos. Se estudiará el efecto de la presión química ejercida en la red al reemplazar el Se por un calcógeno de menor o menor radio iónico. El análisis de los datos obtenidos será discutido en el marco de las teorías existentes usando colaboraciones activas con los investigadores de la división teoría de la materia condensada. Se incursionará además en el crecimiento de los compuestos con capas intercaladas de metales alcalinos en FeSe, usando un método de síntesis a bajas temperaturas para evitar la mezcla de fases.

Las propiedades anisotrópicas de transporte se realizarán bajo un campo magnético aplicado de hasta 16T con un arreglo experimental que permite medir en función del ángulo entre la muestra y el campo aplicado. Asimismo las mediciones de magnetización se realizarán en un magnetómetro tipo SQUID equipado con un sistema que permite girar la muestra respecto al campo aplicado en dos ejes diferentes.

El lugar de trabajo propuesto es el Laboratorio de Bajas Temperaturas. Los resultados preliminares ya obtenidos en el grupo, así como el acceso al equipamiento necesario para la preparación de los materiales monocristalinos y para la

realización de los experimentos planteados garantizan el desarrollo del plan de trabajo propuesto. La caracterización composicional y estructural de las muestras se realizarán en otros laboratorios del CAB a los que se tiene acceso de manera regular. Asimismo la colaboración activa con el grupo de teoría de la materia condensada aseguran un espacio para la discusión de los resultados y aplicación de modelos para un mejor entendimiento de los problemas físicos involucrados.

La financiación para la línea de investigación en la que se insertará el trabajo particular propuesto para esta maestría están garantizados por subsidios de la ANPCyT, la Secyt de la Universidad de Cuyo y Conicet.

- [1] Alberto Martinelli, Fabio Bernardini, Sandro Massidda, C. R. Physique 17, 5-35 (2016).
- [2] A. Kreisel, Shantanu Mukherjee, P. J. Hirschfeld, and Brian M. Andersen, Phys Rev. B 92, 224515 (2015).
- [3] M. L. Amigó, M. V. Ale Crivillero, D. G. Franco, A. Badía Majós, J. Guimpel, G. Nieva. J. Phys.: Conf. Ser 507, 012001 (2014).
- [4] M. V. Ale Crivillero, M. L. Amigó, D. G. Franco, A. Badía-Majós, J. Guimpel and G. Nieva, J. Low Temp. Phys. 179, 9-14. (2015).
- [5] F.C. Hsu et al., Proc. Nat. Acad. Sci. 105, 14262 (2008).
- [6] Y. Mizuguchi et al., Appl. Phys. Lett. 94, 012503 (2009).
- [7] K.W. Yeh et al., J. Phys. Soc. Japan 77, 19 (2008).
- [8] J.G. Guo, S.F. Jin, G. Wang, S.C. Wang, K.X. Zhu, T.T. Zhou, M. He, X.L. Chen, Phys. Rev. B 82, 180520 (2010).
- [9] A. Krzton-Maziopa, Z. Shermadini, E. Pomjakushina, V. Pomjakushin, M. Bendele, A. Amato, R. Khasanov, H. Luetkens, K. Conder, J. Phys. Condens. Matter. 23, 052203 (2011).
- [10] M.H. Fang, H. D. Wang, C. H. Dong, Z. J. Li, C. M. Feng, J. Chen, H.Q. Yuan, Europhys. Lett. 94, 27009 (2011).
- [11] A. F. Wang, J. J. Ying, Y. J. Yan, R. H. Liu, X.G. Luo, Z.Y. Li, X.F. Wang, M. Zhang, G.J. Ye, P. Cheng, Z. J. Xiang, X.H. Chen, Phys. Rev. B 83, 060512 (2011).
- [12] M. L. Amigó, M. V. Ale Crivillero, D. G. Franco, J. Guimpel, G. Nieva, J. Low Temp. Phys. 179, 15-20, (2015).
- [13] Pengcheng Dai, Jiangping Hu and Elbio Dagotto Nature Physics 8, 708

(2012).

[14] M L Amigó, V Ale Crivillero, D G Franco and G Nieva, *J. Phys.: Conf. Ser.* 568 , 022005 (2014).

[15] J. D. Querales-Flores, M. L. Amigó, G. Nieva and C. I. Ventura *Europhys. Lett*, 113, 17005(2016).

[16] T. Urata, Y. Tanabe, K. K. Huynh, Y. Yamakawa, H. Kontani, and K. Tanigaki *Physical Rev B* 93, 014507 (2016).

## 65. Dinámica ultra-rápida de excitaciones elementales en pozos cuánticos semiconductores

**Director:** Axel Bruchhausen (axel.bruchhausen@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Laboratorio de Fotónica & Optoelectrónica - Gerencia de Física - Centro Atómico Bariloche – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Materia Condensada – **Orientación alternativa:** Interacción Radiación-Materia

**Metodología principal:** Experimental – **Metodología secundaria:** Teórico

**Descripción:** El crecimiento epitaxial, la fabricación y nanoestructuración de materiales semiconductores ha alcanzado niveles sin precedentes en cuanto su nivel de perfección logrando un control sistemático tal, que es posible fabricar estructuras monocristalinas de capas semiconductoras de materiales diferentes con interfaces prácticamente abruptas a la escala de una monocapa atómica. Mediante el diseño estructural (controlando por ejemplo las dimensiones características de cada capa, composición estequiométrica de los compuestos, tipo de dopaje, etc.), es posible hacer ingeniería de los grados de libertad que intervienen (carga, luz, vibraciones, etc.), así como de las interacciones entre los mismos. De esta forma, es posible concebir dispositivos que presentan confinamiento electrónico, confinamiento de los modos vibracionales y de los fotones en el material.

Si bien, por sus implicancias tecnológicas, la interacción entre radiación y materia en semiconductores ha sido objeto de estudio intensivo durante (al menos) las últimas cinco décadas, al reducir las dimensiones a escalas nanométricas muchos aspectos fundamentales son aún fuente de intenso estudio y gran debate en las comunidades, en particular en lo que se refiere a los procesos de interacción y su dinámica a escalas temporales inferiores a los nanosegundos. Los pozos cuánticos (QWs) son un claro ejemplo de ello, y constituyen un ladrillo fundamental para el desarrollo de estructuras funcionales más complejas. Los pozos cuánticos forman un sistema suficientemente ‘simple’ desde la descripción de sus autoestados materiales no interactuantes, como para hacer énfasis en el estudio más fundamental de los mecanismos de acoplamiento e interacción entre fotones, electrones y fonones. En situaciones estacionarias y de equilibrio termodinámico, la física estadística proporciona poderosas herramientas para la descripción de los estados de la materia (funciones de distribución de Fermi-Dirac y Bose-Einstein). Por el contrario, en las situaciones transitorias y de no equilibrio como las que se propone estudiar experimentalmente, estas descripciones termodinámicas carecen de validez, y es necesario utilizar otras descripciones cuyos resultados aún deben ser confrontados con las situaciones empíricas.

Este trabajo propone estudiar experimentalmente la dinámica los mecanismos fundamentales de interacción entre fotones, excitaciones electrónicas elementa-

les, y vibraciones en pozos cuánticos (SQWs: single quantum wells). La propuesta de este trabajo contempla el estudio en este tipo de estructuras semiconductoras, caracterizarlas por medio de técnicas de espectroscopía óptica (luminiscencia, reflectividad, dispersión Raman, etc.), y estudiar la dinámica transitoria (de no equilibrio) mediante técnicas de espectroscopía de óptica ultra-rápida. Dependiendo de los intereses del candidato, es posible complementar los estudios experimentales con el modelado teórico de los resultados, ya sea mediante códigos existentes en el laboratorio, o implementando modelos acordes a la necesidad. Este proyecto se realizará en cooperación con otros miembros del laboratorio, y en colaboración con el grupo de fabricación de este tipo de dispositivos en el laboratorios del Centro Atómico Bariloche.

## 66. Dispositivos de estado sólido para computación cuántica

**Director:** Daniel Dominguez (domingd@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Division Teoria de la Materia Condensada – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Materia Condensada – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Teórico – **Metodología secundaria:** Computacional

**Descripción:** En la actualidad hay una enorme actividad experimental y teórica dedicada a explorar diferentes implementaciones técnicas para construir computadoras cuánticas. Se trata de dispositivos que pueden almacenar información en sistemas cuánticos de dos niveles llamados bits cuánticos o "qubits". Las operaciones de cómputo se realizan mediante la superposición cuántica de estados de qubits y el control del entrelazado de información de los mismos. Esto permite resolver varios problemas en muy pocos pasos de cálculo comparado con las computadoras clásicas. Actualmente existen varios sistemas materiales que son candidatos a ser la plataforma tecnológica para el 'hardware' de una computadora cuántica. La implementación física de qubits se ha podido realizar experimentalmente en: espines nucleares, trampas de iones, fotones, circuitos eléctricos semiconductores (puntos cuánticos) y superconductores (dispositivos Josephson). Entre estas implementaciones, los dispositivos de estado sólido se destacan especialmente ya que pueden integrarse en circuitos de alta escalabilidad. Asimismo, el estudio de bits cuánticos de estado sólido ha dado lugar a la investigación de problemas fundamentales de decoherencia en sistemas cuánticos abiertos y control cuántico en sistemas forzados fuera de equilibrio. El desafío experimental es el de diseñar un dispositivo cuya dinámica de bajas energías se reduzca a dos niveles cuánticos cuyo estado pueda ser medido confiablemente, que puedan ser acoplados de manera controlada con otros qubits, que su dinámica esté lo suficientemente protegida de los efectos de ruido del entorno, y que puedan ser escaleados a un gran número de qubits. Los dispositivos superconductores se encuentran dentro de los sistemas que son estudiados intensamente dentro de este enfoque, logrando en la actualidad el acoplamiento y control coherente de varios qubits. Otro enfoque en información cuántica basada en dispositivos de estado sólido, explota las propiedades únicas de resonancia de ciertas transiciones atómicas, cuya fineza supera las de las cavidades mecánicas más estables. Los iones de tierras raras en matriz cristalina combinan las virtudes de los sistemas atómicos con las ventajas de estar albergados como impurezas de baja concentración en cristales transparentes, caracterizándose por poseer una muy débil interacción con el entorno. Este tipo de dispositivos son apropiados para realizar memorias cuánticas. Estas memorias deben ser capaces de mantener el carácter cuántico de la información que almacenan y de devolverla a demanda, es decir, en un instante determinado por control externo. Se

buscan en este caso sistemas materiales donde las transiciones atómicas que almacenarán la información presenten tiempos de vida media largos, de modo que el tiempo de almacenamiento sea lo más extenso posible.

El objetivo general de la de tesis de maestría será en trabajar en el modelado de dispositivos cuánticos de estado sólido, controlados coherentemente lejos del equilibrio. Dependiendo de las inquietudes del candidato, el trabajo se puede orientar en tres líneas diferentes

(i) Electrodinámica cuántica de circuitos de qubits superconductores acoplados: entrelazamiento y decoherencia bajo excitaciones de radiofrecuencia de alta amplitud. (ii) Decoherencia y control de memorias cuánticas en iones de tierras raras en matriz cristalina: modelado de experimentos y mecanismos de control coherente.

Para ello se emplearán herramientas numéricas y analíticas, para resolver la ecuación de Schrodinger dependiente del tiempo en presencia de ruidos externos (ec. de Schrodinger estocástica) y la ecuación para la evolución de la matriz densidad en la aproximación markoviana. Se planea emplear el formalismo de Floquet para el estudio de nanocircuitos forzados por campos externo periódicos de alta intensidad, con la intención de modelar experimentos recientes en qubits de flujo y en qubits de carga.

Colaboradores: El trabajo propuesto será en colaboración con María José Sánchez del Grupo Teoría de la Materia Condensada. En el caso de optar por el tema (ii), memorias cuánticas, la tesis podrá contar con una parte experimental en colaboración con María Florencia Pascual Winter.

Cursos a realizar: Teoría de Sólidos I (1), Teoría de Campos I (1), Información Cuántica (1/2), Topucos de Fisica Computacional (1/2), Fenomenología de la Materia Condensada (1), Sistemas Estocásticos (1).

Bibliografía básica y Lecturas sugeridas:

Computación cuántica:

D. Ladd et al, Nature 464, 45 (2010).C. H. Bennet, Physics Today, October 1995, p.24;

M. A. Nielsen, I. L. Chuang, Quantum Computation and Quantum Information (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2000).

Memorias cuánticas: W. Tittel et al, Laser & Photon. Rev. 4, 244 (2010).

Superconducting Circuits for Quantum Information: An Outlook, M. H. Devoret and R. J. Schoelkopf, Science 339, 1169 (2013);

‘Atomic physics and quantum optics using superconducting circuits’, J. Q. You

and F. Nori, *Nature* 474, 589-597 (2011).

Publicaciones del director en el área:

A. Ferrón and D. Domínguez, *Phys. Rev. B* 81, 104505 (2010).

A. Ferrón, D. Domínguez, and M. J. Sánchez, *Phys. Rev. B* 82, 134522 (2010)

A. Ferrón, D. Domínguez, and M. J. Sánchez, *Phys. Rev. Lett.* 109, 237005 (2012)

A. Ferrón, D. Domínguez, and M. J. Sánchez, *Phys. Rev. B* 93, 064521 (2016).

## **67. Efectos multibanda en propiedades electrónicas (conductividad óptica, transporte y efecto Hall) de nuevos superconductores basados en Fe o Bi.**

**Director:** Cecilia Ventura (ventura@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Division Teoria de la Materia Condensada – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Materia Condensada – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Teórico – **Metodología secundaria:** Experimental

**Descripción:** Una revisión reciente[1] agrupa a los materiales superconductores conocidos en 32 clases: cada una con estructura cristalina, composición y propiedades físicas similares, y presumiblemente con un mecanismo común para la superconductividad. Para muchas clases sigue pendiente la identificación del mecanismo relevante para la superconductividad, que comúnmente se designa como “convencional” si puede ser descrita mediante la teoría de superconductividad BCS-Eliashberg-Migdal asociada a la interacción electrón-fonón. Otros superconductores no pueden describirse por la teoría convencional, o bien porque su superconductividad existe hasta temperaturas críticas demasiado altas, como los cupratos superconductores[2] o porque hay propiedades físicas que dan indicios de que el mecanismo de acoplamiento entre electrones sería “no convencional”: mediado por excitaciones distintas a los fonones, por ej. electrónicas o magnéticas, como se cree en el caso de los nuevos superconductores basados en Fe descubiertos en 2008 [3]. Como en los cupratos superconductores, allí la superconductividad resulta al dopar un compuesto precursor antiferromagnético, con los iones magnéticos ubicados en planos, y correlaciones electrónicas relevantes. Rápidamente, se descubrieron varias otras familias de ferropnictidos [3,4] y luego calcogenuros de Fe con propiedades similares [3,5], y más recientemente superconductividad en compuestos donde los Fe aparecen ordenados en “escaleras” como BaFe<sub>2</sub>S<sub>3</sub> [6]. El interés en la investigación teórica y experimental de los nuevos superconductores no convencionales basados en Fe queda evidenciado por más de 15.000 trabajos publicados desde 2008.[4] Recientemente, investigamos propiedades electrónicas del estado normal paramagnético de los nuevos superconductores no convencionales basados en Fe. Para ferropnictidos superconductores, empleamos un modelo con dos orbitales efectivos correlacionados[7]. Calculamos las funciones de Green electrónicas dependientes de temperatura, con un tratamiento perturbativo para desacoplar las ecuaciones de movimiento, apropiado para las correlaciones electrónicas intermedias de estos materiales. Describimos las características del estado normal evidenciadas por experimentos de ARPES (fotoemisión con resolución angular) y realizamos predicciones de un comportamiento con temperatura atípico para la densidad espectral y densidad de estados, vinculado a contribuciones de regiones de la 1ra zona de Brillouin aún no explorados por ARPES.[7] En otro trabajo, pre-

dijimos propiedades espectrales y los efectos del dopaje sobre la superficie de Fermi para los nuevos compuestos superconductores con planos de BiS<sub>2</sub> [8]. En un primer trabajo teórico-experimental realizado en colaboración recientemente, presentamos mediciones y pudimos describir teóricamente las propiedades de magnetotransporte y efecto Hall en  $\beta$ -FeSe [9]. También confirmamos el efecto de la transición entre la fase ortorrómbica a la tetragonal en  $\beta$ -FeSe sobre la estructura electrónica [9], encontrando que la deformación de la red cristalina induce desdoblamientos de energías de bandas obteniendo valores compatibles con datos de ARPES [9]. Una detallada revisión reciente[10] de experimentos de transporte en ferropnictidos, señala varios problemas abiertos vinculados al carácter multibanda de la estructura electrónica, con la presencia de electrones y huecos alrededor del nivel de Fermi, y sus variaciones con dopaje y temperatura, que influyen las propiedades de transporte. Proponemos abordar dichos problemas abiertos en este trabajo de maestría teórico-experimental. En el Laboratorio de Bajas Temperaturas se están realizando experimentos de transporte eléctrico aplicando campos magnéticos altos ( hasta 16 T) en estos calcogenuros de Fe monocristalinos preparados en el mismo laboratorio[11]. Los experimentos incluyen mediciones de resistencia longitudinal y transversal (resistencia Hall) con configuraciones de contactos que permiten estudiar propiedades anisotrópicas de estos materiales que son concomitantes con la estructura de bandas del material [12]. Concretamente, se propone estudiar propiedades de transporte y magnetotransporte, efecto Hall, y conductividad óptica para la fase normal de diversos superconductores no convencionales basados en Fe [4,10] o en BiS<sub>2</sub> [8]. Desde el punto de vista experimental, la propuesta es participar en mediciones de magneto- transporte en calcogenuros de Fe con campos magnéticos elevados. Desde el punto de vista teórico, se determinarán las propiedades de transporte, magnetotransporte y conductividad óptica para los materiales mencionados mediante una adaptación del modelo microscópico de dos orbitales efectivos correlacionados, su tratamiento analítico perturbativo desarrollado para obtener las funciones de Green [7,8] y en particular las funciones de correlación relevantes según la formulación de Kubo de respuesta lineal [9], con el objetivo de describir los resultados experimentales y realizar predicciones.

#### REFERENCIAS:

- [1] J.E. Hirsch, M.B. Maple y F. Marsiglio, introducción (págs. 1-8) del vol. especial: Physica C 514 (2015).
- [2] J.G. Bednorz y K.A. Müller, Zeitschrift für Physik B 64, 189 (1986).
- [3] Y. Kamihara et al., J. A. Chem. Soc. 130, 3926 (2008). Ver también revisiones de su bibliografía como: Q. Si, R. Yu y E. Abrahams, Nature Reviews/Materials publicado online 11/ 3/ 2016 - doi:10.1038/natrevmats.2016.17; el vol. especial: Sol. Stat. Commun. 152, 631 (2012); J. Paglione y R.L. Greene, Nat. Phys. 6, 645 (2010).

- [4] H. Hosono y K.Kuroki, *Physica C* 514, 399 (2015).
- [5] C.C. Chang et al., *Physica C* 514, 423 (2015).
- [6] H. Takahashi et al, *Nature Materials* 14, 1008–1012 (2015); N.D.Patel et al, *cond-mat/1604.03621 preprint* (13/4/2016).
- [7] J.D. Querales Flores, C.I. Ventura, R. Citro y J.J. Rodríguez-Núñez, *Physics Letters A* 1648-1657 (2016); J.D. Querales Flores, Tesis de Doctorado en Física ( Marzo 2016, Instituto Balseiro, Univ. Nac. de Cuyo. Dirección: Dra. C.I. Ventura).
- [8] J.D. Querales Flores, C.I. Ventura, R. Citro y J.J. Rodríguez-Núñez, *Physica B* 488, 32-42 (2016).
- [9] J.D. Querales Flores, M.L. Amigó, G. Nieva y C.I. Ventura, *Europhysics Letters* 113, 17005-(1-6) (2016).
- [10] F. Rullier-Albenque, *Comptes Rendus Physique* 17, 164-187 (2016).
- [11] M.L. Amigó, M.V. Ale Crivillero, D.G. Franco and G. Nieva, *J. Phys.: Conf. Ser.* 568 , 022005 (2014). doi:10.1088/1742-6596/568/2/022005 ; M.L. Amigó, M.V. Ale Crivillero, D.G. Franco, J. Guimpel, G. Nieva, *J. Low Temp. Phys.* Vol. 179, Issue 1-2, pp 15-20, (2015). doi: 10.1007/ s10909-014-1255-9;
- [12] M.L. Amigó, Tesis de Doctorado en Física (2017, Instituto Balseiro, Univ. Nac. de Cuyo. Dirección: Dra. G.L.Nieva).

## 68. Efectos de dopaje y temperatura sobre las propiedades electrónicas de superconductores basados en Fe.

**Director:** Cecilia Ventura (ventura@cab.cnea.gov.ar)

**Lugar de trabajo:** Division Teoria de la Materia Condensada – **Lugar de trabajo alternativo:** -

**Orientación:** Materia Condensada – **Orientación alternativa:** -

**Metodología principal:** Teórico – **Metodología secundaria:**

**Descripción:** En 2008 se descubrió que un material de estructura laminar con Fe-As, La ( $O_{1-x}F_xFeAs$ ), exhibía superconductividad con temperatura crítica de 26 K para dopaje  $x = 0.1$ . [1] Esto concitó gran interés, [2] por su posible vinculación con los cupratos superconductores de alta temperatura crítica [3] donde también la superconductividad resulta al dopar un compuesto antiferromagnético, con los iones magnéticos ubicados en planos, y correlaciones electrónicas relevantes. Poco después se descubrieron varias otras familias de ferropnictidos, [2,4] y también calcogenuros de Fe con propiedades similares. [2,5] El interés de la investigación teórica y experimental en el área queda evidenciado por las más de 15.000 investigaciones publicadas desde 2008. [4] Si bien hay aún muchos interrogantes abiertos, con el trabajo realizado se ha alcanzado consenso respecto de algunos puntos básicos. [2,4,5] Por ej., los compuestos precursores de referencia (sin dopar) son metálicos, a diferencia de los cupratos superconductores, y exhiben un (tipo de antiferro-)magnetismo relativamente débil, evidenciando además un fuerte acoplamiento de la magnetización con la estructura cristalina, midiéndose en gral. momentos magnéticos un orden de magnitud más pequeños que los calculados con métodos ab-initio de estructura de bandas. [2,4] Hay evidencia de mecanismos electrónicos involucrados en la superconductividad, que aparece cuando el dopaje es suficiente para destruir el orden magnético, con una brecha superconductora (gap) sin nodos, quedando excluida la superconductividad de simetría “d” observada en los cupratos superconductores. [2]

Recientemente, investigamos las propiedades espectrales del estado normal paramagnético de los ferropnictidos superconductores empleando un modelo con dos orbitales efectivos correlacionados [6]. Calculamos las funciones de Green electrónicas dependientes de temperatura, y en particular la función densidad espectral, con un tratamiento perturbativo para desacoplar las ecuaciones de movimiento, apropiado para las correlaciones electrónicas intermedias de estos materiales. Con la renormalización por correlaciones dada por la autoenergía obtenida (con dependencia del impulso cristalino, dopaje y temperatura), pudimos describir las características del estado normal evidenciadas por experimentos de ARPES (fotoemisión con resolución angular). Además, realizamos predicciones de un comportamiento con temperatura atípico para la densidad espectral y densidad de estados, vinculado a contribuciones correspondientes a impulsos cristalinos regiones de la 1ra zona de Brillouin aún no explorados

por ARPES.[6] En otro trabajo reciente, predijimos propiedades espectrales y los efectos del dopaje sobre la superficie de Fermi para los nuevos compuestos superconductores con planos de BiS<sub>2</sub> [7].

En este trabajo de maestría se propone que el alumno estudie propiedades electrónicas, en particular las espectrales, de la fase normal de diversos calcogenuros de Fe [5], como la familia FeSe<sub>1-x</sub>Tex, adaptando el modelo microscópico de dos orbitales efectivos correlacionados y tratamiento analítico perturbativo previamente desarrollado[6,7] para contemplar características específicas de estos materiales. Como antecedente, podemos mencionar nuestra descripción del magnetotransporte en  $\beta$ -FeSe [8] con colegas de Bajas Temperaturas del CAB. Se dispone de datos de experimentos de fotoemisión,[9] ARPES [10] y dispersión inelástica de neutrones[11] en estos compuestos. Para mejorar la descripción de propiedades electrónicas [9,12] obtenidas experimentalmente, analizaremos la posibilidad de incluir un tercer orbital efectivo en nuestro tratamiento.

#### REFERENCIAS:

- [1] Y. Kamihara et al., J. A. Chem. Soc. 130, 3926 (2008).
- [2] Ver, por ej., revisiones de la bibliografía en: Q. Si, R. Yu y E. Abrahams, Nature Reviews/Materials publicado online 11/ 3/ 2016 - doi:10.1038/natrevmats.2016.17; el vol. especial: Sol. Stat. Commun. 152, 631 (2012); J. Paglione y R.L. Greene, Nat. Phys. 6, 645 (2010).
- [3] J.G. Bednorz y K.A. Müller, Zeitschrift für Physik B 64, 189 (1986).
- [4] H. Hosono y K.Kuroki, Physica C 514, 399 (2015).
- [5] C.C. Chang et al., Physica C 514, 423 (2015).
- [6] J.D. Querales Flores, C.I. Ventura, R. Citro y J.J. Rodríguez-Núñez, Physics Letters A 1648-1657 (2016); J.D. Querales Flores, Tesis de Doctorado en Física ( Marzo 2016, Instituto Balseiro, Univ. Nac. de Cuyo. Dirección: Dra. C.I. Ventura).
- [7] J.D. Querales Flores, C.I. Ventura, R. Citro y J.J. Rodríguez-Núñez, Physica B 488, 32-42 (2016).
- [8] J.D. Querales Flores, M.L. Amigó, G. Nieva y C.I. Ventura, Europhysics Letters 113, 17005-(1-6) (2016).
- [9] P. Mishra et al., J. Phys.: Condens. Matter 26, 425501 (2014).
- [10] A. van Roekeghem et al., Comptes Rendus Physique 17, 140-163 (2016).
- [11] J. Wen, Annals of Physics 358, 92 (2015); D. S. Inosov, Comptes Rendus Physique 17, 60-89 (2016).

[12] H. Lohani et al., *Physica C* 512, 54-60 (2015); M.Daghofer et al, *Phys. Rev. B* 81, 014511 (2010); T. Shiota et al., *J. Phys. Soc. Japan* 85, 053706 (2016).  
<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.85.053706> (cond-mat 1604.04056).