

# CIF |

# Congreso de Investigaciones Formativas



Libro de resúmenes del Congreso de Investigaciones Formativas IFLP / Lucas Melia ...[et al.]; Compilación de Verónica Liz Diaz De Rosa; Mauro Granado; Coordinación general de María Teresa Dova ; Fotografías de Marcela Andrea Taylor. - 1a ed - La Plata: Universidad Nacional de La Plata. Facultad de Ciencias Exactas, 2024.

Libro digital, PDF - (Libro de resúmenes del Congreso de Investigaciones Formativas; 1)

Archivo Digital: descarga y online

ISBN 978-950-34-2516-9

1. Congreso. 2. Instituto de Investigación. 3. Investigación de Campo. I. Melia, Lucas II. Diaz De Rosa, Verónica Liz, comp. III. Granado, Mauro, comp. IV. Dova, María Teresa, coord. V. Taylor, Marcela Andrea, fot.

CDD 001.4

ISBN 978-950-34-2516-9



A standard 1D barcode representing the ISBN 978-950-34-2516-9. The barcode is composed of vertical black lines of varying widths on a white background.

9 789503 425169



## COMITÉ ORGANIZADOR:

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

## COLABORADORES:

- **Lic. Lucas Manzo**  
Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP), Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina.
- **Dr. Arles Gil Rebaza**  
Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP), Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina.
- **Dra. Claudia Rodriguez**  
Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP), Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina.
- **Dr. Fernando Montani**  
Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP), Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina.
- **Dra. Marta Reboiro**  
Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP), Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina.

- **Dra. Mariela Portesi**

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

- **Dr. Francisco Alonso**

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

- **Dr. Ignacio Bruvera**

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

- **Dra. Patricia Hansen**

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

| CRONOGRAMA MIERCOLES 6/5 |                            |  |
|--------------------------|----------------------------|--|
| 09:00 - 09:15            | APERTURA DEL EVENTO        |  |
| 09:15 - 09:30            | Lucas Melia                | Crecimiento de ZnO por electrodeposición a partir de pilas alcalinas agotadas y su aplicación en la fotodegradación del azul de metileno                             |
| 09:30 - 09:45            | Carolina Otonelo           | Nanopartículas magnéticas para purificación de biomoléculas  |
| 09:45 - 10:00            | Francisco Sili             | Búsqueda de resonancias photon+jet en el detector ATLAS del LHC  |
| 10:00 - 10:15            | Yanet Alvarez              | Entrelazamiento de Estado Puros: de Bipartito a Multipartito   |
| 10:15 - 10:45            | CAFÉ                       |  |
| 10:45 - 11:00            | Victoria Machain           | Biopolímeros naturales para Ingeniería de tejido óseo  |
| 11:00 - 11:15            | Juan Manuel Pujol          | Relaciones de reciprocidad en sistemas cuánticos discretos   |
| 11:15 - 11:30            | Jean Yves Beaucamp         | Búsqueda de nuevas partículas escalares livianas con leptones tau en el experimento ATLAS del LHC  |
| 11:30 - 11:45            | Lucas Emilio Martín        | Límite de Regge de amplitudes de dispersión de glueballs desde la dualidad Gauge/Strings   |
| 11:45 - 12:00            | Mauro Granado              | Enfoque simbólico multiescala para la decodificación de las bandas de oscilación alta y delta como biomarcadores de descargas epilépticas                            |
| 12:00 - 14:00            | ALMUERZO                   |  |
| 14:00 - 14:15            | Lucas Manzo                | Integrales de camino para fermiones en espacios con borde  |
| 14:15 - 14:30            | Fernando Lomoc             | Formalismo de estados historia en caminatas aleatorias cuánticas   |
| 14:30 - 14:45            | Florencia Urruchua         | Aportes a la economía circular: obtención de biocarbones magnéticos a partir del residuo de yerba mate y bagazo de cerveza para la remoción de contaminantes en agua |
| 14:45 - 15:00            | Santiago Tanco             | Inferencia Bayesiana en Física de Altas Energías   |
| 15:00 - 15:15            | Agustín Cianciulli         | Estimación del hamiltoniano a partir de matrices densidad de M cuerpos   |
| 15:15 - 15:45            | CAFÉ                       |  |
| 15:45 - 16:00            | Martin Parlanti            | Dispersión 2 a 2 en el límite de altas energías desde amplitudes de dispersión de la teoría de supercuerdas del tipo IIB   |
| 16:00 - 16:15            | Ulises Wainstein-Haimovich | Campos clásicos de fondo y cuánticos   |
| 16:15 - 16:30            | Malena Taube               | Simulaciones en PET  |
| 16:30 - 16:45            | Federico Petrovich         | Formalismo para factorización generalizada basado en covarianza  |
| 16:45 - 17:00            | Viviano Fernandez          | Dinámica no hermética: Modelo de Swanson   |

| CRONOGRAMA VIERNES 8/5 |                               |   |
|------------------------|-------------------------------|---|
| 09:00 - 09:15          | Natalí Guisande               | Introducción al espacio causal complejidad-entropía de Renyi  |
| 09:15 - 09:30          | Martín Lagares                | Lazos de Wilson y amplitudes de dispersión en teorías de campos superconformes  |
| 09:30 - 09:45          | Monserrat Pallares Di Nunzio  | Transferencia de información entre bandas de pacientes con episodios epilépticos  |
| 09:45 - 10:00          | Giuliano Andrés Basso         | Determinación del tiempo de relajación de NPM expuestas a campos magnéticos de radiofrecuencia  |
| 10:00 - 10:15          | Carlo Salvattore Cruz Sanchez | Comparación entre simulaciones de ZHAireS y CoREAS para emisiones de radio en rayos cósmicos  |
| 10:15 - 10:45          | <b>CAFÉ</b>                   |   |
| 10:45 - 11:00          | Gastón Brusasco               | Estado fundamental estructural y magnético de las cromitas $X\text{Cr}_2\text{O}_4$ ( $X = \text{Zn, Cd, Hg}$ ). Estudio basado en DFT y la influencia del parámetro de Hubbard         |
| 11:00 - 11:15          | Facundo Lorenzo Cruz          | Teoría Cuántica de Campos en espacio-tiempo de Sitter   |
| 11:15 - 11:30          | Daniel Díaz                   | Búsqueda de observables para distinguir el signo relativo entre acoplamientos escalar y pseudoescalar $t\bar{t}H$ .   |
| 11:30 - 11:45          | Nadia Belén Capdet            | Hipertermia magnética vs cáncer   |
| 11:45 - 12:00          | Indira Vergara Quispe         | Rayos gamma bajo la lupa de los Observatorios SWGO y Pierre Auger   |
| 12:00 - 14:00          | <b>ALMUERZO</b>               |   |
| 14:00 - 14:15          | Veronica Diaz De Rosa         | Desarrollo y caracterización de materiales con aplicación ambiental: monitoreo y remediación de contaminantes   |
| 14:15 - 14:30          | Nahuel Diaz                   | Mecánica cuántica en el espacio-tiempo  |
| 14:30 - 14:45          | Federico Tomás Pérez          | Max-Ent Restricted Dynamics in Many-Body Physics  |
| 14:45 - 15:00          | Julián Andrés Zúñiga          | Estudio de la anisotropía magnética del $\text{TiO}_2$ (anatasa) debido a efectos estructurales. Importancia del acoplamiento espín-órbita en DFT                                       |
| 15:00 - 15:15          | Hans Kevin Narro Arias        | Determinación del momento cuadrupolar nuclear del $^{47}\text{Ti}$ y $^{49}\text{Ti}$ . Comparación entre los métodos autoconsistente en el marco de la Teoría de la Funcional Densidad |
| 15:15 - 15:45          | <b>CAFÉ</b>                   |   |
| 15:45 - 16:00          | Maximiliano Gabriel Ferro     | Explorando la vereda iluminada o por qué estudiar modelos no-realistas en teorías de campos y gravedad  |
| 16:00 - 16:15          | Javier Feijoo                 | Transporte cuántico y transiciones de fase en nanoestructuras híbridas semiconductor-superconductor-aislante ferromagnético   |
| 16:15 - 16:30          | Jonatan Chaves                | Efectos de interacciones electrodébiles de corriente neutras en dispersión inelástica profunda del protón desde la teoría de supercuerdas   |
| 16:30 - 16:45          | Gaspar Gonzalez               | Cuantificadores de información aplicada al estudio del límite clásico   |
| 16:45 - 17:00          | S. Lizeth Chucchucan Gonzalez | Estructura y propiedades electrónicas, térmicas y de transporte de materiales calcogenuros basados en Te para aplicaciones termoeléctricas  |
| 17:00 - 17:15          | <b>CLAUSURA DEL EVENTO</b>    |   |

## **Lista de Oradores - Miércoles 8/5**

### **Bloque 1:**

- Lucas Melia
- Carolina Otonelo
- Yanet Alvarez

### **Bloque 2:**

- Victoria Machain
- Juan Manuel Pujol
- Jean Yves Beaucamp
- Lucas Emilio Martín
- Mauro Granado

### **Bloque 3:**

- Lucas Manzo
- Fernando Lomoc
- Florencia Urruchua
- Santiago Tanco
- Agustín Cianciulli

### **Bloque 4:**

- Martín Parlanti
- Ulises Wainstein-Haimovich
- Malena Taube
- Federico Petrovich
- Viviano Fernández

## **Lista de Oradores - Viernes 10/5**

### **Bloque 5:**

- Natalí Guisande
- Martín Lagares
- Monserrat Pallares Di Nunzio
- Giuliano Andrés Basso
- Carlo Salvattore Cruz Sanchez

### **Bloque 6:**

- Gastón Brusasco
- Facundo Lorenzo Cruz
- Daniel Díaz
- Nadia Belén Capdet
- Indira Vergara Quispe

### **Bloque 7:**

- Verónica Díaz De Rosa
- Nahuel Díaz
- Federico Tomás Pérez
- Julián Andrés Zúñiga
- Hans Kevin Narro Arias

### **Bloque 8:**

- Javier Feijoo
- Jonatan Chaves
- Santos Lizeth Chucchucan González

# PRESENTACIONES ORALES

---

# Películas de ZnO obtenidas por electrodeposición a partir de pilas alcalinas recicladas para la remoción de contaminantes en agua

L. MELIA<sup>1</sup>, L. JUNCAL<sup>1</sup>, S. RABAL<sup>1</sup>, M. V. GALLEGOS<sup>2</sup>, M. MEYER<sup>1</sup>, F. IBAÑEZ<sup>3</sup>, L. DAMONTE<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup> Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas, “Dr. Jorge J. Ronco” (CINDECA), CONICET-UNLP-CIC, La Plata, Argentina

<sup>3</sup> Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas, Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Universidad Nacional de La Plata (UNLP), Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina

email: [lmelia@iflp.unlp.edu.ar]

Este trabajo presenta la síntesis de películas delgadas de ZnO mediante electrodeposición utilizando soluciones obtenidas de pilas alcalinas agotadas. Se evaluaron las propiedades estructurales, morfológicas y ópticas de las películas de ZnO usando técnicas como DRX, HR-FESEM, espectroscopía UV-Vis y AFM, observándose que el tipo de precursor y el pH de la solución influyen directamente en el crecimiento. Las muestras obtenidas de soluciones recicladas presentaron morfologías irregulares, mientras que las soluciones comerciales mostraron un crecimiento más controlado y ordenado, con estructuras de nanocolumnas.

El comportamiento fotocatalítico del ZnO se evaluó en la degradación de azul de metileno, un contaminante común en aguas industriales. Las películas obtenidas a partir de soluciones recicladas demostraron ser más eficientes, logrando más del 80 % de degradación por miligramo de ZnO. Este rendimiento superior se atribuye al menor tamaño de grano en las muestras recicladas, lo que aumenta la superficie activa disponible para la reacción. Además, las películas mostraron alta estabilidad, manteniendo su eficiencia tras varios ciclos de uso.

El estudio destaca el potencial de la electrodeposición como una técnica sencilla, económica y fácilmente escalable para producir películas de ZnO homogéneas y con interesantes propiedades estructurales y ópticas. La factibilidad de utilizar fuentes recicladas, proporciona no solo una solución ambientalmente amigable al reducir el impacto del residuo peligroso, sino que también el ZnO resultante se utiliza para remover contaminantes en el agua. Esta doble función de reciclaje y remediación convierte a esta metodología en una opción prometedora para aplicaciones industriales a gran escala.

# Nanopartículas magnéticas para purificación de biomoléculas

C. OTONELO<sup>1,2</sup>, E. DE SOUSA<sup>1</sup>, L. JUNCAL<sup>1</sup>, K. SALCEDO RODRÍGUEZ<sup>1</sup>, M. J. PENELAS<sup>3</sup>, S. ONS<sup>2</sup>, P. MENDOZA ZÉLIS<sup>1</sup>, C. LAYANA<sup>2</sup>, C. RODRÍGUEZ TORRES<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup> *Laboratorio de Neurobiología de Insectos (LNI), Centro Regional de Estudios Genómicos, Facultad de Ciencias Exactas (FCE), UNLP, CENEXA, CONICET, La Plata, Argentina*

<sup>3</sup> *Laboratorio Argentino de Haces de Neutrinos, GAIDI, CAC, CNEA, San Martín, Argentina*

email: [carolinaotonelo@iflp.unlp.edu.ar]

En las industrias farmacéuticas y biotecnológicas, los procesos de extracción, purificación y/o concentración de biomoléculas a partir de muestras complejas constituyen entre el cincuenta y noventa por ciento de los costos. Un método de purificación que permite abaratarlos, es el uso de nanopartículas magnéticas (NPM) funcionalizadas con recubrimientos específicos para cada tipo de biomoléculas. El proceso de purificación con NPM resulta más económico ya que permite independizarse del uso de equipos de cromatografías y centrífugas, muy costosos para adquirirlos y para mantenerlos. Asimismo, se evita la necesidad de comprar insumos como columnas comerciales importadas y caras. En cambio, para el uso de las NPM solo se necesita del uso de un imán capaz de captarlas y los buffers de muy bajo costo. El objetivo del proyecto es la síntesis de tres tipos de NPM funcionalizadas para purificar: ácidos nucleicos, proteínas recombinantes con tag de Histidinas y anticuerpos de diferentes matrices. Mediante el método de co-precipitación de hierro II y hierro III, se sintetizan las NPM las cuales mediante la hidrólisis alcalina de tetraetilortosilicato (TEOS) se recubren con sílice. Estas NPM@TEOS además de utilizarse en la purificación de ácidos nucleicos, son el punto de partida para los recubrimientos de las nanopartículas para purificar proteínas recombinantes y anticuerpos. Para el recubrimiento de NPM capaces de purificar proteínas recombinantes, nos fundamentamos en la afinidad de las histidinas por el Níquel +2, mientras que para la purificación de anticuerpos nos basamos en la química Spy-Tag/Spy-Catcher para inmovilizar proteínas en NPM reduciendo el riesgo de desnaturalización de proteínas que suele producirse en los procesos de inmovilización convencionales. En todos los pasos intermedios de estas síntesis se analizaron la composición y estructura de las NPM, utilizando dispersión dinámica de luz, potencial Z, microscopía de transmisión electrónica, termogravimetría, difracción de rayos X y espectroscopía infrarroja, mientras que las propiedades magnéticas se caracterizaron a través de medidas de fuerza magnética y ciclos de histéresis. Se realizaron ensayos preliminares que demostraron la capacidad de las NPM de pegar y eluir específicamente las biomoléculas de interés en diferentes tipos de muestras.

# Entrelazamiento multipartito: cuantificación y propiedades

Y. ALVAREZ<sup>1</sup>, G. M. BOSYK<sup>1</sup>, M. PORTESI<sup>1</sup>

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

email: [yalvarez@iflp.unlp.edu.ar]

El entrelazamiento es un concepto clave en la mecánica cuántica y constituye el origen de diversos fenómenos que no pueden abordarse dentro de la física clásica. Resulta esencial en muchas áreas de la teoría de la información cuántica, como la codificación superdensa, la teleportación cuántica y la criptografía cuántica. Sin embargo, el problema general de cómo cuantificar el grado de entrelazamiento en un sistema multipartito arbitrario aún no ha sido resuelto de manera completa, por lo tanto merece que nos detengamos en ello.

Aunque caracterizar completamente la naturaleza multipartita de las correlaciones es una tarea difícil, existen medidas computables simples de entrelazamiento que se pueden considerar [3, 1, 2]. Estas diferentes definiciones a menudo no concuerdan entre sí, principalmente porque tienden a capturar diferentes aspectos del fenómeno; no obstante, pueden proporcionar indicadores útiles.

Con el estudio de estados de tres qubits, ya se pueden apreciar características del entrelazamiento multipartito, como por ejemplo la relación de monogamia, la cual establece que el entrelazamiento entre dos de sus partes limita el entrelazamiento que pueden tener con la restante [4]. Esta propiedad es fundamental en el estudio de medidas de entrelazamiento multipartito. En este sentido, se discutirán algunas propiedades que deben cumplir dichos cuantificadores y se mencionarán algunas medidas utilizadas en la cuantificación del entrelazamiento multipartito [5, 6].

## Referencias

- [1] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, and K. Horodecki. *Quantum entanglement*. Rev. Mod. Phys. **81**, 865 (2009).
- [2] I. Bengtsson and K. Życzkowski. *Geometry of Quantum States: An Introduction to Quantum Entanglement* (Cambridge University Press, 2017).
- [3] Y. Guo and L. Zhang. *Multipartite entanglement measure and complete monogamy relation*. Phys. Rev. A **101**, 032301 (2020).
- [4] V. Coffman, J. Kundu, and W. K. Wootters. *Distributed entanglement*. Phys. Rev. A **61**, 052306 (2000).
- [5] A. J. Scott. *Multipartite entanglement, quantum-error-correcting codes, and entangling power of quantum evolutions*. Phys. Rev. A **69**, 052330 (2004).
- [6] S. Szalay. *Multipartite entanglement measures*. Phys. Rev. A **92**, 042329 (2015).

# Biopolímeros naturales para ingeniería de tejido óseo

MACHAIN, VICTORIA<sup>1</sup>, BOSIO, VALERIA<sup>1</sup>

<sup>1</sup> BIOMIT Lab, Instituto de Física La Plata (IFLP), CONICET-UNLP, Argentina

email: [vmachain@fisica.unlp.edu.ar]

Para la reconstrucción del tejido óseo a partir de ingeniería de tejidos, los biopolímeros naturales constituyen una fuente útil en la búsqueda de emular la estructura del hueso esponjoso debido a su biocompatibilidad, biodegradabilidad, sustentabilidad y la posibilidad de gelificar formando estructuras diversas. A su vez, los mismos permiten la incorporación de moléculas cargo, como antibióticos, para disminuir el riesgo de infección propio de una intervención quirúrgica.

La ingeniería de estructuras trabeculares permite imitar la matriz extracelular ósea donde podrán alojarse las células generadoras de hueso en una zona de tejido dañado. Será deseable que dichas matrices presenten propiedades osteogénicas, de osteoinductividad y osteoconductividad. En especial, la fibroína de seda, una proteína natural constituyente principal de la hebra del capullo de seda, presenta la característica de adoptar una estructura de lámina  $\beta$ , la cual le otorga gran cristalinidad y resistencia, tanto a esfuerzos mecánicos como a la degradación, mientras que su ductilidad y propiedades de biodegradabilidad y biocompatibilidad la hacen especialmente atractiva para el desarrollo de estructuras para andamiaje celular de tejido óseo.

En este trabajo de Tesis Doctoral, se desarrollaron estructuras de tipo poro interconectado basadas en seda de origen natural y su combinación con otros biopolímeros, a partir de diferentes métodos de gelificación: calentamiento en presencia de solventes, incubación en metanol a bajas temperaturas seguido de liofilización y procesos de salt-leaching con NaCl de 500  $\mu\text{m}$  de tamaño de cristal. Estas estructuras de tipo andamio han sido caracterizadas estructuralmente mediante cálculos de porcentaje de lámina  $\beta$  (FTIR); térmicamente (TGA); mecánicamente con ensayos de tracción y compresión; en sus propiedades de degradación y estabilidad en el tiempo en presencia de medios simulados; en cuanto a su biocompatibilidad mediante ensayos celulares normados y en sus propiedades de adhesión celular. Las estructuras seleccionadas fueron testeadas en capacidades de carga y liberación de antibióticos, así como poder antimicrobiano para antibióticos clásicamente empleados en osteomielitis. Para estos ensayos se evaluó la incorporación y liberación controlada en el tiempo del antibiótico, alcanzando valores constantes y superiores a la concentración mínima inhibitoria. Los antibiogramas comprobaron acción antimicrobiana para las estructuras seleccionadas.

# Relaciones de reciprocidad en sistemas cuánticos discretos

J. M. PUJOL<sup>1</sup>, M. PORTESI<sup>1</sup>, F. HOLIK<sup>1</sup>

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

email: [pujol@iflp.unlp.edu.ar]

Proponemos una relación de compromiso usando una discretización de la información de Fisher, medida en ciertas bases complementarias conocidas como MUBs (por *mutually unbiased bases*). A partir de esto, definimos una cantidad relacionada y estudiamos su comportamiento en distintos tipos de estados, específicamente: estados aleatorios puros de 2 y 3 qubits, estados aleatorios mixtos de 2 qubits, y estados de Werner.

Encontramos que dicho cuantificador no puede ser nulo para estados puros, mientras que para estados mixtos puede tomar valores arbitrariamente pequeños, llegando a ser nulo para el estado maximamente mezclado. Además, estudiando estados mixtos de 2 qubits, encontramos que esta cantidad está correlacionada con la concurrencia y la pureza.

# Búsqueda de resonancias escalares de baja masa decayendo a pares *boosteados* de leptones tau, y estudios de performance en el Trigger de Taus del Experimento ATLAS

J. Y. BEAUCAMP<sup>1</sup>, H. P. WAHLBERG<sup>1</sup>, M. T. DOVA<sup>1</sup>

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

email: [jean.yves.beaucamp@cern.ch]

La posible existencia de nuevas partículas más allá del Modelo Estándar (ME) en la escala del TeV está motivada teóricamente por consideraciones de naturalidad para la escala electrodébil y la necesidad de obtener la abundancia correcta de materia oscura en el universo. Sin embargo, todavía no hay evidencia concluyente de nueva física en los resultados recientes de las investigaciones con datos del LHC (Gran Colisionador de Hadrones) del CERN. Esto obliga a repensar y re-optimizar las estrategias de nuevas búsquedas, focalizándose en regiones de bajas masas, poco exploradas hasta el presente debido a su dificultad experimental. La búsqueda de resonancias escalares en producción asociada y decayendo a fermiones de tercera generación (quarks top, quarks bottom, y leptones tau) se encuentra particularmente motivada debido a la dependencia lineal de la intensidad de la interacción con la masa de los fermiones interactuantes.

En este trabajo se presenta el desarrollo de una búsqueda de un nuevo bosón escalar en el rango de masas de 10 a 60 GeVs, producido en asociación con un par de quarks top, y decayendo a un par de leptones tau en su canal de decaimiento hadrónico. Debido a la gran diferencia en la masa de los quarks top ( $m_t = 172,7$  GeV) y la potencial nueva partícula liviana, la resonancia se produciría con un elevado *boost*, por lo que el par de taus en los que decayaría en su estado final se observarían solapados entre sí en el detector. Esta condición experimental requiere del diseño y uso de nuevas técnicas de reconstrucción, calibración, e identificación de pares de tau *boosteados* como un único objeto *di-tau*.

Como parte de las mejoras del Experimento ATLAS en preparación para la mayor luminosidad en el período de *Run 3* (2022-2026), se reemplazó el hardware y los algoritmos utilizados en el *Level-1 Trigger* (L1), responsable de preseleccionar rápidamente colisiones de potencial interés para su registro y posterior análisis. En el presente trabajo se describe la calibración y puesta en funcionamiento de nuevos algoritmos de identificación y selección de leptones tau implementados en los FPGAs del L1, utilizando técnicas de Machine Learning.

# Límite de Regge de amplitudes de dispersión de glueballs desde la dualidad gauge/strings

L. MARTIN<sup>1</sup>, M. PARLANTI<sup>1</sup>, M. SCHIVELLINGER<sup>1</sup>

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

email: lucasmartinar@iflp.unlp.edu.ar

Partiendo de la dualidad AdS/CFT, analizamos teorías de *gauge* conformes. Esta dualidad nos permite vincular una teoría conforme como es  $\mathcal{N}=4$  SYM con una teoría de cuerdas de tipo II B en el espacio  $AdS_5 \times S^5$ . Estableciendo un *cut off* dado por  $r_{min} \sim \Lambda R^2$  y analizando amplitudes que ocurran en  $r_{scatt} \sim (\sqrt{\alpha'} p) r_{min}$ , se obtiene una dependencia funcional para la amplitud de *scattering* que reproduce el comportamiento *hard* típico de las teorías de *gauge*.

Estudiamos primero el caso de la dispersión de 4 *glueballs*. Existe una correspondencia entre estados de las dos teorías y mediante ese mapeo podemos analizar la dispersión de 2 a 2 dilatones. Desde teoría de cuerdas, el valor de la amplitud se factoriza en una dependencia de las variables cinemáticas de Mandelstam, con una forma funcional característica con funciones Gamma, y un factor cinemático que depende de los impulsos y las polarizaciones de las partículas que intervienen. El término cinético de cuerdas cerradas se puede escribir como el producto de dos términos de cuerdas abiertas. Este factor cinemático debe ser calculado para cada una de las configuraciones de campos que se busque estudiar. En el caso de los *glueballs*, el mismo está compuesto de  $225 \times 81$  términos, debido a la forma que adoptan las polarizaciones de los campos. Obtuvimos así la expresión completa exacta de la amplitud de dispersión. Luego, tomamos el límite de Regge para estudiar procesos de altas energías. En función de las variables de Mandelstam, el mismo está dado por  $s \gg |t|$ . Así, pudimos realizar aproximaciones en las funciones Gamma y obtener la dependencia deseada para la amplitud de dispersión (en el régimen de ángulo pequeño).

En paralelo realizamos el mismo cálculo para la amplitud de 4 dilatones y actualmente nos encontramos trabajando también en el proceso de Dispersión Inelástica Profunda, el cual permite estudiar en profundidad las funciones de estructura hadrónicas.

# Enfoque simbólico multiescala para decodificar la banda delta y las bandas de oscilaciones de alta frecuencia como biomarcadores de descargas epilépticas

M. GRANADO<sup>1</sup>, F. MICELI<sup>1</sup>, F. MONTANI<sup>1</sup>

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

email: [mgranado@iflp.unlp.edu.ar]

Utilizamos un enfoque simbólico multiescala para estudiar la compleja dinámica de la epilepsia refractaria del lóbulo temporal empleando un electroencefalograma intracraneal de alta resolución (iEEG). Considerando las fases basales y preictales analizamos la dinámica a través del estudio de las bandas de frecuencia, centrándonos en oscilaciones de alta frecuencia de hasta 240 Hz. Nuestros resultados revelan periodicidades significativas y escalas de tiempo críticas dentro de la dinámica neuronal a través de las distintas bandas de frecuencia. Mediante un filtrado pasabanda de las señales neuronales en bandas delta, theta, alfa, beta, gamma y oscilaciones de alta frecuencia (HFO), cada una asociada a procesos neuronales específicos, examinamos las distintas dinámicas no lineales. Nuestro método introduce un enfoque fiable para señalar las escalas de desfase intrínseco  $\tau$  dentro de las bandas de frecuencia de las señales basales y preictales, que son cruciales para el estudio de la epilepsia refractaria. Utilizando métricas como la entropía de permutación ( $H$ ), la información de Fisher ( $F$ ) y la complejidad ( $C$ ), exploramos patrones no lineales dentro de las señales iEEG. Revelamos los  $\tau_{max}$  intrínsecos que maximizan la complejidad dentro de cada banda de frecuencia, desvelando los sutiles patrones no lineales de las estructuras temporales dentro de la señal basal y preictal. El estudio de los valores  $H \times F$  y  $C \times F$  nos permite identificar diferencias en la banda delta y en una banda entre 200 y 220 Hz (HFO 6) al comparar señales basales y preictales. Las diferencias en la información de Fisher en las bandas delta y HFO 6 antes de los ataques de epilepsia destacan su papel en la captura de importantes dinámicas del sistema. Esto ofrece nuevas perspectivas sobre la intrincada relación entre las oscilaciones delta y las HFOs en pacientes con epilepsia focal, destacando la importancia de estos patrones y su potencial como biomarcadores.

# Integrales de camino para fermiones en espacios con borde

L. MANZO<sup>1</sup>, P. PISANI<sup>1</sup>

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

email: [lucasmanzo@fisica.unlp.edu.ar]

Las integrales de camino son herramientas fundamentales en Mecánica Cuántica (QM) para el cálculo de amplitudes de evolución en teorías de primera cuantización. En las últimas décadas, han ganado relevancia también en Teoría Cuántica de Campos (QFT) mediante el Formalismo de Línea de Mundo, el cual permite representar cálculos de QFT en términos de las amplitudes de transición de una partícula auxiliar cuya dinámica es descrita por una teoría en QM.

A pesar de su importancia, no se dispone aún de una formulación completa de las integrales de camino en espacios con borde. En el caso de partículas escalares, el método de las imágenes permite abordar esta problemática bajo condiciones de borde Dirichlet, Robin o Neumann. Sin embargo, el estudio de otras condiciones de borde o de campos de distinta naturaleza sigue siendo un tema abierto de investigación.

En esta charla, se abordará el origen del problema de las integrales de camino en variedades con borde y su resolución mediante el método de las imágenes para un campo escalar. Posteriormente, se extenderá el análisis a la construcción de integrales de camino para un campo espinorial bajo condiciones de borde tipo bolsa MIT. Esta última sección se basa en arXiv:2403.00218.

# Formalismo de estados historia en caminatas aleatorias cuánticas para una moneda de Grover

F. LOMOC<sup>1</sup>, A. BOETTE<sup>1</sup>, N. CANOSA<sup>1</sup>, R. ROSSIGNOLI<sup>2</sup>

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

<sup>2</sup> Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP), Comisión de Investigaciones Científicas (CIC), La Plata, Argentina

email: [ferlomoc@fisica.unlp.edu.ar]

Se emplea el formalismo de estados historia en el marco de las caminatas aleatorias cuánticas en una dimensión. Se analiza la denominada moneda de Grover (spin 1), y se comparan los resultados con los correspondientes a la moneda de Hadamard (spin 1/2). El formalismo permite describir la caminata completa en base a un estado y conduce al concepto de entrelazamiento sistema-tiempo, el cual es una medida del número de sitios ortogonales visitados en la caminata. En el caso de spin 1, la entropía de entrelazamiento sistema-tiempo, así como la información mutua, dependen fuertemente de la orientación inicial de spin, a diferencia del caso de spin 1/2, donde estas cantidades resultan independientes de la orientación inicial para estados iniciales reales con paridad definida y monedas reales. Se examina también la evolución de los subsistemas de espín y posición en base al formalismo. Finalmente, se analiza una posible aplicación de la noción de estados historia al campo de las series temporales.

# Aportes a la economía circular: obtención de biocarbonos magnéticos a partir del residuo de yerba mate para la remoción de contaminantes en agua

F. C. URRUCHUA<sup>1</sup>, M. A. FERNÁNDEZ<sup>1</sup>, M. L. MONTES<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Centro de Tecnología de Recursos Minerales y Cerámica (CETMIC), Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Comisión de Investigaciones Científicas (CIC), Gonnet, Argentina

<sup>2</sup> Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP), Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina

email: [fcurruchua@cetmic.unlp.edu.ar]

En el marco de la economía circular, el presente trabajo presenta resultados de la reutilización de yerba mate gastada para desarrollar adsorbentes de contaminantes emergentes (CE) presentes en agua. La biomasa se pirolizó (350 °C), obteniendo el biocarbón BCy. Una porción de BCy fue activada (KOH a 800 °C), obteniendo el material BCy-Act. Sobre los 2 materiales se realizó la síntesis de óxidos de hierro mediante tres metodologías: Impregnación Pirólisis (IP)1, Oxidación Alcalina (OA)2 y coprecipitación (COP)3. Estos compositos fueron caracterizados composicional, estructural, química y magnéticamente y fueron evaluados como adsorbentes de Atenolol (ATE) y Paracetamol (PCT), CE tipo fármacos.

El proceso de activación modificó significativamente el área superficial de BCy, aumentándola de 2 a 940 m<sup>2</sup>/g. Los compositos obtenidos desde BCy presentaron área superficial mayor que BCy, pero los obtenidos a partir de BCy-Act presentaron menor valor que BCy-Act. Este hecho puede deberse a que los óxidos de hierro presentan relativamente baja área superficial, lo que genera una disminución en los materiales activados, pero aumentan la de BCy, ya que su área superficial es aún menor que la de los óxidos.

La magnetización de saturación (Ms) varió dependiendo del método de síntesis. Los compositos desarrollados por COP presentaron mejor respuesta magnética que los obtenidos por las demás metodologías. Cuando se utilizó el biocarbón activado, la Ms resultó menor que los obtenidos para los materiales derivados de BCy, por lo que el proceso de activación afecta la formación de óxidos de hierro magnéticos.

Los materiales activados presentaron muy buenos porcentajes de remoción, mayores al 50 % en todos los casos, partiendo de concentraciones iniciales de 200 mg/L. El compuesto con mayor sorción fue BCy-Act-COP, removiendo más del 70 % de ambos contaminantes. Se puede concluir que el residuo de yerba es un buen precursor para la obtención de biocarbonos magnéticos y que el compuesto BCy-Act-COP, que presentó mayor Ms y mayor sorción de contaminantes, es el material con mayor potencial de ser usado en tratamientos de aguas.

## Referencias

- [1] F. Gao, Z. Xu, and Y. Dai. *Removal of tetracycline from wastewater using magnetic biochar: A comparative study of performance based on the preparation method*. Environmental Technology and Innovation **24**, 101916 (2021). doi:10.1016/j.eti.2021.101916.
- [2] H. Bartonkova, M. Mashlan, I. Medrik, D. Jancik, and R. Zboril. *Magnetically modified bentonite as a possible contrast agent in MRI of gastrointestinal tract*. Chemical Papers **61**(5), 413–416 (2007). doi:10.2478/s11696-007-0057-9.
- [3] M. Y. Badi, A. Azari, H. Pasalari, A. Esrafil, and M. Farzadkia. *Modification of activated carbon with magnetic  $Fe_3O_4$  nanoparticle composite for removal of ceftriaxone from aquatic solutions*. Journal of Molecular Liquids **261**, 146–154 (2018). doi:10.1016/j.molliq.2018.04.019.

# Inferencia bayesiana en física de altas energías: una generalización del método ABCD

E. ÁLVAREZ<sup>1</sup>, L. DA ROLD<sup>2</sup>, M. SZEWC<sup>3</sup>, A. SZYNKMAN<sup>4</sup>, S. TANCO<sup>4</sup>, T. TARUTINA<sup>4</sup>

<sup>1</sup> *International Center for Advanced Studies (ICAS) e ICIFI-CONICET, Universidad Nacional de San Martín (UNSAM), San Martín, Argentina*

<sup>2</sup> *Centro Atómico Bariloche, Instituto Balseiro y CONICET, S.C. de Bariloche, Argentina*

<sup>3</sup> *Department of Physics, University of Cincinnati, Cincinnati, USA*

<sup>4</sup> *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP), Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina*

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

Tanto en la búsqueda de Nueva Física como en la mejora de nuestro conocimiento del Modelo Estándar en el Gran Colisionador de Hadrones (LHC), uno de los factores clave es el diseño de estrategias de búsqueda que utilicen de manera eficiente la información disponible. Dada la complejidad para modelar y simular, al nivel de precisión requerido, las señales y fondos esperados, resultan sumamente útiles las técnicas de análisis basadas en datos. Dentro de ellas se encuentra el método ABCD, comúnmente utilizado.

Nos enfocamos en optimizar el método ABCD mediante técnicas de Aprendizaje Automático, en particular utilizando Inferencia Bayesiana. Proponemos que un conjunto de datos con señal y múltiples fondos puede describirse adecuadamente usando un modelo de mezcla, donde las fracciones de la señal y los fondos, así como los parámetros que modelan las distribuciones de los observables, se extraen utilizando el conocimiento previo y dependencias entre observables a nivel de evento. A diferencia del método ABCD, que requiere cortes rígidos y dos observables independientes, el marco bayesiano aprovecha la disponibilidad de múltiples observables y el uso de distribuciones continuas para realizar una asignación suave de los eventos. Para comparar ambos métodos, usamos un problema simplificado inspirado en la producción de dos Higgs con decaimientos a 4 quarks *bottom*:  $pp \rightarrow hh \rightarrow b\bar{b}b\bar{b}$ , modelando los procesos con distribuciones simplificadas para la identificación de los jets y la masa invariante de los pares de jets.

En esta charla presentamos nuestra prueba de concepto, detallando el modelo de mezcla que utilizamos en el enfoque bayesiano y comparando su rendimiento con los resultados arrojados por ABCD. El enfoque bayesiano muestra una mejora en la extracción de la fracción de señal en escenarios con 1 % y 0,5 % de señal verdadera, superando la sensibilidad del método ABCD, y también es robusto ante la ausencia de señal.

# Reconstrucción de Hamiltonianos a partir de matrices densidad

A. CIANCIULLI<sup>1</sup>, R. ROSSIGNOLI<sup>2</sup>, J. M. MATERA<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup> Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP), Comisión de Investigaciones Científicas (CIC), La Plata, Argentina

email: [agustincianciulli@gmail.com]

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

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

M. PARLANTI<sup>1</sup>, L. MARTIN<sup>1</sup>, M. SCHVELLINGER<sup>1</sup>

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

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

En el estudio de procesos de dispersión para altas energías desde la teoría de supercuerdas se obtiene un comportamiento *soft* en la amplitud respecto a la energía de centro de masa, y por lo tanto no se reproduce el comportamiento *hard* de la fenomenología de la física de partículas. En un trabajo pionero del 2001, Polchinski y Strassler encuentran un ansatz con el cual logran obtener este comportamiento *hard* para procesos 2 a m glueballs, los cuales son duales a estados de cuerdas cerradas mediante el uso de la conjectura de Maldacena. En este trabajo se analizan con mayor detalle procesos de dispersión 2 a 2 glueballs y también 2 a 2 fermiones de spin 1/2 en el modelo *hardwall* desde la dualidad AdS/CFT. Se estudiaron dos límites: procesos para ángulo fijo y el límite de Regge. Entendemos los glueballs y los fermiones como los estados correspondientes que son creados por operadores de la teoría  $\mathcal{N} = 4$  SYM  $D = 4$  y los cuales son duales a cuerdas cerradas que corresponden a dilatones y a dilatinos en la teoría de supercuerdas del tipo *IIB*. Se obtiene comportamiento *hard* para ambos casos en el proceso de ángulo fijo y en el límite de Regge se reproduce el resultado de la propagación de un gravitón en la dispersión de cuatro dilatones y un modo vectorial en la dispersión de cuatro dilatinos.

## Referencias

- [1] J. Polchinski and M. Strassler. *Deep inelastic scattering and gauge/string duality*. Phys. Rev. D **66**, 123511 (2001). doi:10.1103/PhysRevD.66.123511.
- [2] A. Maldacena. *The large- $N$  limit of superconformal field theories and supergravity*. Adv. Theor. Math. Phys. **2**, 231 (1998). doi:10.4310/ATMP.1998.v2.n2.a1.

# Campos clásicos de fondo y cuantucosas

U. WAINSTEIN-HAIMOVICH<sup>1</sup>, P. PISANI<sup>1</sup>, D. DÁSCANIO<sup>1</sup>

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

email: [ulises2357@iflp.unlp.edu.ar]

La charla describió dos trabajos vinculados a efectos semi clásicos no-perturbativos en campo de fondo (perturbativos a primer orden cuántico).

Uno de los trabajos fue el estudio de creación de pares en teorías de yang mills puro abeliano en un espacio no conmutativo (que debido a la no-conmutatividad resulta ser interactuante) utilizando los elementos que se utilizan para encontrar creación de pares en la resolución de la paradoja de Klein, por el estudio de las soluciones clásicas a las perturbaciones de fondo en la teoría. Además, se realizó un estudio pormenorizado de las soluciones y se encontró la presencia de estados ligados.

# Desarrollo de simulaciones computacionales en PET-CT con métodos reconstructivos algebraicos iterativos

M. TAUBE<sup>1</sup>, S. SCIUTTO<sup>1</sup>

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

email: [malena.taube@fisica.unlp.edu.ar]

En los últimos años, los estudios con equipos PET-CT han demostrado ser una herramienta valiosa para mejorar los diagnósticos médicos. Los procedimientos de adquisición de datos y los algoritmos de reconstrucción son factores claves para ayudar a mejorar la capacidad diagnóstica de estos estudios.

El objetivo de este trabajo es desarrollar un software de simulaciones completo que abarque todas las etapas del proceso de generación de una imagen. Para la realización de simulaciones de los procesos de interacción entre radiación y materia, se utiliza el programa FLUKA con rutinas de desarrollo propio para el fantoma elegido. En una primera instancia se trabaja con la simulación de un equipo PET-CT ideal, despreciando efectos tales como eventos espurios, ruido, etc., con el propósito de proveer un entorno ventajoso para poner de relieve con máxima claridad las características del algoritmo de reconstrucción. La cadena simulación-reconstrucción se puede dividir en pasos más pequeños en los cuales se analizan los datos de la simulación, se construyen mapas de actividades de los fantomas simulados y, finalmente, se utiliza un algoritmo de reconstrucción para la imagen, por ejemplo, el método algebraico iterativo Maximum Likelihood Expectation Maximization (MLEM). Como resultado del proceso de reconstrucción se obtiene un mapa tridimensional de la actividad reconstruida. Disponer de los datos generados en todas las etapas de reconstrucción de la imagen permite realizar comparaciones útiles para valorar la calidad del proceso de reconstrucción.

En este trabajo, se discute el estado del desarrollo del mencionado software y se presentan algunos primeros resultados, teniendo como objetivo principal ayudar a mejorar la capacidad diagnóstica de los estudios PET-CT y ser una herramienta valiosa para la medicina nuclear.

# Método basado en covarianza para hallar autoestados exactos factorizados en sistemas interactuantes

F. PETROVICH<sup>1</sup>, R. ROSSIGNOLI<sup>2</sup>, N. CANOSA<sup>1</sup>,

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

<sup>2</sup> *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP), Comisión de Investigaciones Científicas (CIC), La Plata, Argentina*

email: [fede.petrov@gmail.com]

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

# Evolución temporal de sistemas PT-simétricos: El Hamiltoniano de Swanson

V. FERNÁNDEZ<sup>1</sup>, R. RAMIREZ<sup>2</sup>, M. REBOIRO<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Universidad Nacional de La Plata (UNLP), La Plata, Argentina

<sup>2</sup> Instituto Argentino de Matemática Alberto P. Calderón (IAM), Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Argentina

<sup>3</sup> Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP), Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), La Plata, Argentina

email: [vfernandez@mate.unlp.edu.ar]

Describimos la dinámica generada por el hamiltoniano de Swanson. Este Hamiltoniano representa un sistema no-hermítico, generalización del oscilador armónico comprimido en incertezza. Los Hamiltonianos no-hermíticos se caracterizan por una transición de fase dinámica en el espacio de parámetros del modelo. En la fase con simetría PT exacta, los espectros toman valores reales. En la fase con ruptura de simetría aparecen pares de estados con energías complejas conjugadas. El límite entre las dos fases está formado por los llamados Puntos Excepcionales (PEs). En estos puntos dos o más autovalores y sus correspondientes autoestados son coalescentes.

El modelo Swanson es de dimensión infinita. En la fase PT-simétrica, el Hamiltoniano es similar al hamiltoniano de un oscilador armónico. En la fase con ruptura de simetría, el Hamiltoniano de Swanson es similar a un oscilador invertido, y sus autofunciones no son funciones del espacio de Hilbert.

Para describir la dinámica de este problema trabajamos dentro del formalismo de espacios de Hilbert equipados, extendiendo la noción de bi-ortogonalidad. Esta interpretación nos permite computar la evolución temporal en la fase con ruptura de simetría. Los resultados presentados están consignados en un trabajo titulado "Swanson Hamiltonian: non-PT-symmetry phase", publicado en Journal of Physics A: Math. Theor., 55 (2022), 015303. La continuación de este trabajo ha sido publicada en "Swanson Hamiltonian revisited through the Complex Scaling Method", Acta Polytechnica 62 (2022) 157, y "Complex Scaling Method applied to the study of the Swanson Hamiltonian in the broken PT-symmetry phase" [1].

## Referencias

- [1] V. Fernández, R. Ramírez, and M. Reboiro. *Complex Scaling Method applied to the study of the Swanson Hamiltonian in the broken PT-symmetry phase*. arXiv preprint arXiv:2405.04599 (2024).

# Espacio causal de entropía–complejidad de Rényi

N. GUISANDE<sup>1</sup>, F. MONTANI<sup>1</sup>

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

email: [guisande.natali@fisica.unlp.edu.ar]

En esta charla se presentó el espacio causal de Entropía–Complejidad de Rényi, una herramienta diseñada para diferenciar características en series temporales mediante la combinación de la entropía de Rényi con su complejidad estadística generalizada. Basándose en la metodología de patrones ordinarios de Bandt and Pompe, se construyeron distribuciones de probabilidad que permitieron generar curvas tridimensionales correspondientes a la entropía de Rényi y su complejidad estadística, variando el parámetro  $q$  de Rényi. Se discutieron las cotas teóricas y el posicionamiento de sistemas dinámicos clásicos dentro de este espacio. Además, se demostró su utilidad para explorar dinámicas libres de escala, destacando la relación entre cambios en el exponente de la ley de potencias y variaciones en la entropía de Rényi. Finalmente, se presentaron ejemplos prácticos, como la diferenciación de series temporales simuladas de ruido correlacionado (k-noise) y su aplicación en datos experimentales de iEEG para la diferenciación de características. Los detalles completos de esta investigación pueden encontrarse en la publicación correspondiente: <https://doi.org/10.3389/fncom.2024.1342985>.

# Lazos de Wilson y amplitudes de dispersión en teorías superconformes

M. LAGARES<sup>1</sup>, D. CORREA<sup>1</sup>

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

email: [martinlagares95@gmail.com]

La teoría cuántica de campos (QFT) surge como un marco para unificar los postulados de la cuántica con la relatividad especial. Genéricamente, las QFTs están parametrizadas por constantes de acoplamiento, que cuantifican la intensidad de las interacciones. Los observables pueden calcularse perturbativamente en términos de diagramas de Feynman, cuya complejidad crece rápidamente a medida que uno avanza en la expansión perturbativa. En este contexto, resulta interesante estudiar métodos no perturbativos y formalismos perturbativos alternativos. En esta charla presenté los resultados de mis primeros tres años de doctorado. A lo largo de ellos estudié, en primer lugar, la aplicación de diferentes métodos no perturbativos al estudio de teorías cuánticas de campos con simetría superconforme. En particular, analicé teorías superconformes unidimensionales definidas por operadores conocidos como Lazos de Wilson. Mi estudio se enfocó en la aplicación de técnicas no perturbativas conocidas como integrabilidad y conformal bootstrap para la caracterización de estas teorías unidimensionales. Por otro lado, en mi doctorado estudié un formalismo perturbativo alternativo para el estudio de amplitudes de dispersión, en términos de estructuras geométricas conocidas como geometrías positivas. El análisis que llevé a cabo consistió en la descripción geométrica de magnitudes que se encuentran libres de divergencias infrarrojas, y que mediante integración permiten obtener amplitudes de dispersión. La presentación fue basada en los trabajos arXiv:2108.09380, arXiv:2303.02996, arXiv:2304.01924, arXiv:2402.17432 y en trabajo en curso.

# Análisis de información mutua en EEG intracranegal para la detección de cambios preictales en pacientes con epilepsia

M. PALLARES DI NUNZIO<sup>1</sup>, F. MONTANI<sup>1</sup>

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

email: [monsepallaresdinunzio@fisica.unlp.edu.ar]

La epilepsia es uno de los trastornos neurológicos crónicos más prevalentes, afectando a más de 50 millones de personas en todo el mundo. Aunque la mayoría de los pacientes responden al tratamiento con fármacos antiepilépticos, aproximadamente el 30 % no logra un control adecuado de las convulsiones, siendo clasificados como resistentes a los medicamentos. En estos casos, la cirugía puede ser una opción, pero no siempre es viable. El electroencefalograma (EEG) es ampliamente utilizado para medir la actividad cerebral, aunque presenta limitaciones en su resolución espacial y puede verse afectado por ruido proveniente de movimientos involuntarios. En consecuencia, el uso de electrodos intracraeales ( $EEG_i$ ) ofrece una alternativa para obtener registros más precisos.

El  $EEG_i$  permite observar la estructura de los ritmos neuronales que interactúan en diferentes escalas espaciotemporales, un fenómeno conocido como acoplamiento cruzado de frecuencias. Este acoplamiento se ha propuesto como un mecanismo clave en la coordinación de funciones cognitivas entre diferentes grupos neuronales. Además, diversos estudios sugieren que los estados preictales pueden identificarse mediante cambios sutiles en las señales del  $EEG_i$ , incluso cuando estos no son detectables visualmente.

En este contexto, el presente estudio emplea el análisis de la información mutua (IM) en  $EEG_i$  multicanal para evaluar la transmisión de información entre distintos ritmos neuronales en pacientes con epilepsia. La IM, que cuantifica las dependencias estadísticas entre dos señales, se propone como un biomarcador potencial para predecir crisis epilépticas.

Los resultados mostraron que en los cuatro pacientes estudiados, el estado preictal se caracterizó por una alta IM entre los ritmos beta-theta, alfa-theta y delta-theta. Sin embargo, este aumento en la IM no pudo atribuirse a un acoplamiento significativo de fase o amplitud entre las diferentes bandas.

# Disipación de potencia por nanopartículas magnéticas en campos de radiofrecuencia

G. BASSO<sup>1</sup>, I. BRUVERA<sup>1</sup>, P. MENDOZA ZÉLIS<sup>1</sup>

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

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

La disipación de potencia por nanopartículas magnéticas (NPM) expuestas a campos de radiofrecuencia (RF) ha permitido el desarrollo de diversas aplicaciones en biomedicina, tales como descongelamiento de tejidos criopreservados [1] y termoterapia oncológica [2]. En este tipo de aplicaciones, las NPM absorben energía del campo y la liberan a su entorno mediante calor. La disipación de potencia tiene su origen cuando la magnetización del sistema  $M(t)$  se retrasa respecto del campo aplicado  $H(t)$ , siendo el parámetro que caracteriza este desfase el tiempo de relajación  $\tau$  del sistema.

Si se considera un sistema magnético con una respuesta  $M(t)$  antisimétrica respecto a la dirección del campo aplicado  $H(t)$ , y tal que su dinámica está determinada por la ecuación de relajación de Shliomis [3], el tiempo de relajación del sistema resulta ser:

$$\tau = \frac{\tan(\phi_1)}{2\pi f}$$

siendo  $f$  la frecuencia del campo RF y  $\phi_1$  la fase del primer armónico de la magnetización  $M(t)$  [4].

En este trabajo se midieron los ciclos magnéticos RF de NPM esféricas ( $d=10(3)$  nm) de magnetita en suspensión de base acuosa durante el descongelamiento del medio portador en el rango [-20; 20] °C. El análisis de los ciclos permitió determinar el tiempo de relajación  $\tau$  en función de la temperatura, pudiendo advertir incrementos de aproximadamente 50 % en el entorno del punto de fusión del agua. Este aumento puede interpretarse como una consecuencia de la alineación de los ejes de anisotropía de las NPM con el campo  $H(t)$  debido a la movilidad que adquieren las NPM al descongelarse su entorno.

## Referencias

- [1] A. Chiu-Lam et al. *SA*, 2021.
- [2] Z. Stephen et al. *AHM*, 2021.
- [3] R. Rosensweig. *JMMM*, 2002.
- [4] P. Mendoza Zélis et al. *SSRN*, 2024.

# Comparación entre simulaciones de ZHAireS y CoREAS para emisiones de radio generadas por rayos cósmicos

C. S. CRUZ SANCHEZ<sup>1,2</sup>, P. HANSEN<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup> Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería, UNLP, La Plata, Argentina

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

La detección de lluvias atmosféricas extensas (EAS) inducidas por rayos cósmicos a través de señales de radio ha avanzado significativamente en las últimas dos décadas. Numerosos experimentos sobre rayos cósmicos de ultra alta energía capturan rutinariamente pulsos de radio en el rango de frecuencias de MHz a GHz emitidos por las EAS.

En este trabajo, analizamos y comparamos los pulsos de radio generados por lluvias atmosféricas extensas utilizando CoREAS y ZHAireS, dos de los paquetes de simulación Monte Carlo más utilizados y reconocidos. El análisis se realizó considerando diferentes partículas primarias, direcciones y configuraciones de campo magnético, utilizando los mismos parámetros para ambos códigos: índice de refracción, umbrales de energía, campo magnético y geometría de la lluvia. Luego seleccionamos 20 simulaciones para garantizar la consistencia de los resultados.

Por otro lado, reconstruimos la profundidad del máximo de la lluvia,  $X_{max}$ , utilizando simulaciones de ambos códigos. Para este análisis, realizamos simulaciones de 50 lluvias inducidas por protones y 50 por hierro, manteniendo constante la energía y la geometría del evento, dejando libre el parámetro  $X_{max}$ , que es el que se busca reconstruir.

Se encontró un muy buen nivel de concordancia entre las simulaciones de CoREAS y ZHAireS, con diferencias típicas inferiores al 10 % en los componentes dominantes del campo eléctrico en un amplio rango de frecuencias, desde unos pocos MHz hasta varios cientos de MHz. Resultados similares se observaron en los mapas de fluencia de energía en el rango de 30 a 80 MHz, que coincide con el rango operativo de la mayoría de los arreglos de antenas terrestres que utilizan la técnica de radio para detectar lluvias atmosféricas extensas. Asimismo, se observó un buen acuerdo en la reconstrucción de  $X_{max}$  entre ambos programas, logrando una resolución de 15 g/cm<sup>2</sup>.

# Estado fundamental estructural y magnético de las cromitas $X\text{Cr}_2\text{O}_4$ ( $X = \text{Zn, Cd, Hg}$ ). Estudio basado en DFT y la influencia del parámetro de Hubbard

C. G. BRUSASCO<sup>1,2</sup>, L. A. ERRICO<sup>1,2,3</sup>, A. V. GIL REBAZA<sup>1,2</sup>

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

<sup>2</sup> Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas (FCE), Universidad Nacional de La Plata (UNLP), La Plata, Argentina

<sup>3</sup> Universidad Nacional del Noreste de la Pcia. de Bs. As. (UNNOBA), Pergamino, Argentina

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

Las cromitas ( $X\text{Cr}_2\text{O}_4$ , estructura espinela, X: metal de transición) son sistemas que han despertado mucho interés tanto desde el punto de vista del magnetismo básico como aplicado, debido a sus potenciales aplicaciones tecnológicas [2, 3]. En estos óxidos, la frustración, el desorden magnético y la competencia entre interacciones de super intercambio entre sitios da lugar a un muy rico espectro de estructuras magnéticas [1]. En este trabajo presentamos resultados del estudio teórico-computacional de las cromitas  $X\text{Cr}_2\text{O}_4$  (X: Zn, Cd y Hg). El mismo se llevó a cabo mediante la Teoría de la Funcional Densidad (DFT). En estos cálculos se emplearon las aproximaciones GGA y GGA+U (donde U es el parámetro de Hubbard) para el término de intercambio-correlación [4], teniendo en cuenta diferentes distribuciones de los cationes X y Cr en los sitios estructurales y considerando diferentes configuraciones de espín, para determinar el estado fundamental estructural y magnético de cada uno de los tres sistemas y las constantes de intercambio  $J_i$  hasta terceros vecinos, a partir de mapear las energías DFT a un modelo efectivo de Heisenberg. Los resultados obtenidos son discutidos y comparados con los obtenidos en ferritas ( $X\text{Fe}_2\text{O}_4$ ) y cálculos reportados en la literatura.

## Referencias

- [1] A. N. Yaresko. Electronic band structure and exchange coupling constants in  $ACr_2O_4$ . (A=Zn, Cd, Hg; X=O, S, Se) spinels. *Physical Review B*, 77, (2008), 115106.
- [2] A.P. Ramirez et al. *Nature*, 286, (1997), 156.
- [3] J. Hemberger et al. *Nature*, 434, (2005), 364.
- [4] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. *Physical Review Letters*, 77 (1996), 3865.

# Mecánica Cuántica en espacio-tiempo basada en foliación dinámica

N. DÍAZ<sup>1</sup>, R. ROSSIGNOLI<sup>2</sup>

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

<sup>2</sup> *Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP), Comisión de Investigaciones Científicas (CIC), La Plata, Argentina*

email: [nldiaz@iflp.unlp.edu.ar]

El espacio de fase convencional de la física clásica trata el espacio y el tiempo de forma diferente, y esta diferencia se transfiere a la mecánica cuántica. En este trabajo, el espacio de fase se amplía mediante dos extensiones. En primer lugar, se promueve la elección del tiempo de la transformada de Legendre a una variable dinámica. En segundo lugar, los corchetes de Poisson son extendidos a una forma simétrica en espacio-tiempo. Sobre esta base, se presenta una cuantización tipo canónica del formalismo, en la que los campos satisfacen relaciones de conmutación espacio-temporales y la foliación es cuántica. En este marco, la acción clásica se promueve a un operador, el cual resulta explícitamente covariante y reemplaza al Hamiltoniano. El esquema convencional se recupera condicionando en estados propios de la foliación, en analogía con el mecanismo de Page y Wootters. Se discute también la generalización de la matriz de densidad a un operador que contiene la información de correladores tanto en espacio como en tiempo.

# Teoría cuántica de campos en de Sitter

F. LORENZO CRUZ<sup>1</sup>, D. CORREA<sup>1</sup>, G. SILVA<sup>1</sup>

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

email: [facundolorenzocruz@gmail.com]

Este trabajo presenta una introducción a la Teoría Cuántica de Campos en espacio-tiempo de Sitter, una solución de las ecuaciones de la Relatividad General de Einstein en condiciones de vacío con constante cosmológica positiva. La motivación principal para el estudio de este espacio-tiempo proviene de la teoría de la inflación, propuesta para resolver algunas paradojas del modelo estándar del Big Bang. Además, dado que actualmente se mide una constante cosmológica positiva, el universo entrará eventualmente en una fase de expansión de Sitter a medida que la materia se diluya. Otra motivación es explorar la posibilidad de una dualidad similar a la de Anti-de Sitter en un contexto físico, más allá de la famosa conjectura de Maldacena o dualidad gauge-gravedad.

Trabajamos en coordenadas de Poincaré, observando la falta de simetría de traslación temporal y escribimos la acción para un campo escalar masivo en estas coordenadas. Resolviendo la ecuación de movimiento, descomponemos el campo en modos usando funciones de Hankel, que asintóticamente en tiempos pasados se comportan como modos de espacio plano. Esta elección de modos define el vacío de Bunch-Davies al cuantizar el campo. Aunque no existe un vacío natural por la falta de simetría temporal, adoptamos el que se asemeja al vacío de Minkowski en el pasado infinito. Una vez definido el vacío, calculamos correladores y funciones de N puntos, resaltando la importancia de los correladores a tiempos iguales en cosmología, ya que conectan directamente con experimentos como el fondo cósmico de microondas (CMB).

# Estudio de Leproquarks Escalares de la Tercera Generación en el LHC mediante Machine-Learned Likelihoods

D. DIAZ<sup>1</sup>, A. SZYNKMAN<sup>1</sup>

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

email: [daniel.diaz@iflp.unlp.edu.ar]

Los leptoquarks son partículas hipotéticas que se acoplan a quarks y leptones. Estas partículas poseen en general carga de color, carga eléctrica fraccionaria, así como diferentes masas, según sus diferentes sabores. En el presente trabajo estudiamos el impacto de los algoritmos de machine-learning en las búsquedas de leptoquarks en el LHC en procesos cuyo estado final está dado por leptones tau decayendo hadrónicamente, múltiples  $b$ -jets, y una gran cantidad de energía perdida en el plano transverso. Se considera como hipótesis la producción de pares de leptoquarks escalares que decaen exclusivamente a quarks y leptones de la tercera generación. Mediante la implementación de herramientas de aprendizaje automático supervisado con métodos *unbinned* para tratar la complejidad debida a la alta dimensionalidad de los estados finales, consideramos cortes de selección simples, esperando que estos impliquen una mejora en los límites de exclusión a 95%  $CL$  de las masas de los leptoquarks para diferentes valores de sus respectivas fracciones de decaimiento a leptones cargados. En particular, para el caso de fracciones de decaimiento intermedias, se espera que los límites de exclusión se extiendan hasta masas de  $\sim 1,3$  TeV para los leptoquarks. Como novedad en la implementación del análisis *unbinned*, se incluyó además una estimación simple de algunas incertezas sistemáticas a fin de estudiar sus posibles impactos en la estabilidad de los resultados obtenidos. Finalmente, se presenta también la proyección de la sensibilidad obtenida a 14 TeV mediante este método para 300 y 3000  $\text{fb}^{-1}$ , extendiendo los límites a  $\sim 1,6$  y  $\sim 1,8$  TeV, respectivamente.

# Hipertermia magnética en modelos celulares tumorales in vitro en 3D

N. B. CAPDET<sup>1</sup>, P. MENDOZA ZÉLIS<sup>1</sup>, M. TASSO<sup>2</sup>

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

<sup>2</sup> Instituto de Nanosistemas (INS), Escuela de Bio y Nanotecnologías, Universidad Nacional de San Martín (UNSAM) - CONICET, San Martín, Argentina

email: [ncapdet@iflp.unlp.edu.ar]

La hipertermia magnética (HM) es una terapia para el cáncer que busca desencadenar la muerte celular de tumores sólidos mediante incrementos de temperatura controlados por encima de los 43°C utilizando nanopartículas magnéticas (NPM) expuestas a campos magnéticos alternos. La estructura monodominio de las NPM de óxido de hierro (magnetita) les confiere la capacidad de absorber energía de campos magnéticos de radiofrecuencia (CMRF) y liberarla al medio circundante en forma de calor. La traslación de los ensayos de HM en cultivos in vitro a pruebas in vivo está marcada por una gran pérdida en la eficacia de calentamiento de las NPM. In vivo, las temperaturas alcanzadas resultaron menores incluso con cantidades muy superiores de NPM en relación con la concentración establecida in vitro necesaria para calentar el mismo volumen. Por otro lado, los esferoides tumorales multicelulares (ETM) constituyen el modelo in vitro más aproximado a los tumores sólidos gracias a su capacidad de mimetizar el ambiente tumoral avascular. El objetivo de este trabajo es evaluar cómo influyen las distintas distribuciones de NPM dentro de los esferoides sobre el efecto final de la HM en la sobrevida del esferoide tumoral. Para ello, se sintetizaron y caracterizaron fisicoquímicamente NPM de magnetita de 17(3) nm de diámetro (TEM) y 23.4(7) nm de diámetro hidrodinámico (DLS), de tipo monodominio magnético, con una tasa de absorción específica (SAR) de 45.2(7) W/g Fe (100 kHz; 52 kA/m), las cuales fueron recubiertas con citrato de sodio. Posteriormente, se formaron esferoides con distintas distribuciones de NPM dentro de su estructura y se aplicó un CMRF (100 kHz y 9.3 kA/m) sobre estas estructuras multicelulares conteniendo NPM. Finalmente, se evaluó el efecto de la HM sobre los esferoides mediante una medida de la viabilidad de las células en presencia y en ausencia de un CM de características compatibles con las empleadas en el ámbito biomédico. El porcentaje de viabilidad celular de los esferoides tratados con el CMRF respecto de aquellos que no fueron expuestos al campo es indicativo del efecto de la HM sobre la sobrevida de estas estructuras multicelulares tumorales.

# Rayos gamma bajo la lupa de los Observatorios SWGO y Pierre Auger

I. D. VERGARA QUISPE<sup>1</sup>, P. HANSEN<sup>1</sup>

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

email: [ivergara@fisica.unlp.edu.ar]

El Observatorio de Rayos Gamma de Gran Campo Visual (SWGO) es un nuevo proyecto basado en la detección de luz Cherenkov en agua, ubicado en el hemisferio sur. Un desafío crucial en el análisis de datos de estos observatorios es diferenciar las cascadas producidas por rayos gamma del abundante fondo de cascadas hadrónicas. En este trabajo, proponemos adaptar el observable  $S_b$ , utilizado exitosamente en estudios de composición en el Observatorio Pierre Auger, a la configuración y energías de SWGO (100 GeV - PeV). Para su implementación efectiva, es esencial tener en cuenta la configuración geométrica del arreglo. En este trabajo, redefinimos el observable  $S_b$  utilizando un factor de escala adecuado para la configuración de SWGO y exploramos cómo este nuevo observable mejora la identificación de rayos gamma, incrementando la sensibilidad del observatorio.

El proyecto AMIGA (Auger Muons and Infill for the Ground Array) es una actualización del Observatorio Pierre Auger que incorpora detectores Cherenkov de agua (SD750), espaciados a 750 m entre sí, junto con detectores subterráneos de muones (UMD), lo que permite estudiar rayos cósmicos en el rango de energía de  $10^{17.5}$  eV -  $10^{18.5}$  eV. En este trabajo, evaluamos la capacidad discriminatoria de varios observables sensibles a la masa de la partícula primaria, obtenidos tanto con el UMD como con el SD750. Además, realizamos un análisis multivariable de estos observables, y nuestros resultados indican que aquellos dependientes de la componente muónica son excelentes discriminadores de rayos gamma. Al aplicar un análisis de discriminación lineal, se mejora la capacidad de separación, permitiendo identificar rayos gamma de manera eficaz. No obstante, cuando se comparan rayos gamma con protones de menor energía, la discriminación basada en la componente muónica disminuye, pero el observable  $\langle \text{AoP} \rangle$ , que depende de la componente electromagnética de la cascada, permite recuperar el poder de discriminación, manteniendo una buena separación entre los eventos.

# Estudio y comparación de dos modelos de Na-Montmorillonita

V. L. DÍAZ DE ROSA<sup>1,2</sup>, R. E. ALONSO<sup>1,2,3</sup>, M. A. TAYLOR<sup>1,3,4</sup>

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

<sup>2</sup> Instituto de Ingeniería y Agronomía, Universidad Nacional Arturo Jauretche (UNAJ), Florencio Varela, Argentina

<sup>3</sup> Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata (UNLP), La Plata, Argentina

<sup>4</sup> Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas (FCE), Universidad Nacional de La Plata (UNLP), La Plata, Argentina

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

La contaminación producida por las industrias y la población altera la calidad del ambiente y debe detectarse y, si es necesario, aplicar diferentes técnicas de remediación de manera temprana. Las tecnologías de remediación más utilizadas se basan en el proceso de sorción de los contaminantes. Entre los materiales absorbentes, los minerales arcillosos, como la montmorillonita (MMT), son prometedores. La montmorillonita tiene una estructura en capas tipo 2: 1 que en estado natural puede alojar diferentes cationes hidratados,  $M-nH_2O$  ( $M = Na, Ca, etc.$ ), en su espaciado interlaminar. Si bien hay numerosos trabajos experimentales en relación a las bondades de la MMT como absorbente, recién en las últimas décadas, los modelos computacionales han aportado información fundamental para entender y predecir el comportamiento de materiales complejos como la Na-MMT.

Este trabajo presenta los resultados de un estudio teórico en el marco de la Teoría Funcional de la Densidad que compara dos modelos estructurales de Na-MMT. Para los cálculos se utilizó el método pseudopotencial y de onda plana (Código Quantum Espresso). La interacción de intercambio-correlación fue descrita utilizando GGA-PBE. Se utilizaron los modelos de Na MMT propuestos por Pirillo et al. [1] y Scholtzová et al. [2], en los mismos se rodeó al átomo de Na por 4 moléculas de  $H_2O$ . Para cada caso, se optimizaron las posiciones atómicas y los parámetros de celda. Para evaluar cuál es el modelo que mejor reproduce la Na-MMT, se compararon los valores de  $d_{001}$  obtenido con los datos determinados mediante DRX. Se consideró para esta comparación un valor de humedad relativa del 23 %, que se corresponde a  $H_2O$ , obteniendo un buen acuerdo entre ellos. A su vez, se determinaron los parámetros hiperfinos en diversos átomos mediante el método GIPAW. Los mismos se compararon con datos reportados en la literatura para sistemas análogos, mostrando que el modelo de Scholtzová et al. es el que tuvo mejor acuerdo.

## Referencias

- [1] S. Pirillo et al. *J. Phys. Chem. C*, vol. 119, no. 28, pp. 16082-16088, jul. 2015, doi: 10.1021/acs.jpcc.5b04061.

- [2] E. Scholtzová et al. *J. Phys. Chem. C*, vol. 122, no. 15, pp. 8380-8389, abr. 2018, doi: 10.1021/acs.jpcc.8b01042.

# Mecánica cuántica en espacio-tiempo basada en foliación dinámica

N. DÍAZ<sup>1</sup>, J. M. MATERA<sup>1,2</sup>, R. ROSSIGNOLI<sup>2,3</sup>

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

<sup>2</sup> Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas (FCE), Universidad Nacional de La Plata (UNLP), La Plata, Argentina

<sup>3</sup> Instituto de Física La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata (UNLP), Comisión de Investigaciones Científicas (CIC), La Plata, Argentina

email: [nldiaz@iflp.unlp.edu.ar]

El espacio de fase convencional de la física clásica trata el espacio y el tiempo de forma diferente, y esta diferencia se transfiere a la mecánica cuántica. En este trabajo, el espacio de fase se amplía mediante dos extensiones. En primer lugar se promueve la elección del tiempo de la transformada de Legendre a una variable dinámica. En segundo lugar, los corchetes de Poisson son extendidos a una forma simétrica en espacio-tiempo. Sobre esta base se presenta una cuantización tipo canónica del formalismo, en la que los campos satisfacen relaciones de commutación espacio-temporales y la foliación es cuántica. En este marco la acción clásica se promueve a un operador, el cual resulta explícitamente covariante y reemplaza al Hamiltoniano. El esquema convencional se recupera condicionando en estados propios de la foliación, en analogía con el mecanismo de Page y Wootters. Se discute también la generalización de la matriz de densidad a un operador que contiene la información de correladores tanto en espacio como en tiempo.

# Dinámicas Max-Ent proyectadas y restringidas para sistemas cuánticos de muchos cuerpos

F. T. B. PÉREZ<sup>1,2</sup>, J. M. MATERA<sup>1,3</sup>

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

<sup>2</sup> Institut Henri Poincaré (IHP), París, Francia

<sup>3</sup> Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas (FCE), Universidad Nacional de La Plata (UNLP), La Plata, Argentina

email: [ftperez@iflp.unlp.edu.ar]

Para abordar los desafíos en el manejo de dinámicas efectivas aproximadas y correlaciones no gaussianas, es crucial reconocer que tanto las dinámicas exactas como los enfoques de la Teoría de Campo Medio (MFT) están confinados a las variedades Max-Ent  $\mathcal{M}_{\text{Max-Ent}}$  de estados  $\sigma$  [1, 2]. Dentro de estas variedades, el estado del sistema, guiado por una ecuación de movimiento de Schrödinger proyectada ortogonalmente, maximiza la entropía de von Neumann mientras comparte los valores esperados de un conjunto de observables independientes, dando lugar a una condición de autoconsistencia.

Este seminario introduce una variación del formalismo que relaja la condición de autoconsistencia y emplea una forma más simple de proyección ortogonal, reduciendo la complejidad numérica asociada a la resolución de estas ecuaciones de movimiento [3]. Como resultado, surge un sistema de ecuaciones diferenciales no lineales que gobiernan la dinámica del logaritmo del operador densidad, independiente de los observables elegidos. Nuestro enfoque, logrado mediante una expansión sistemática de la base de operadores, facilita aproximaciones no perturbativas a las dinámicas exactas.

## Referencias

- [1] E. T. Jaynes. *Information theory and statistical mechanics*. Phys. Rev. **106**, 620–630 (1957).
- [2] R. Balian, Y. Alhassid, and H. Reinhardt. *Dynamical properties of finite quantum systems*. Phys. Rep. **131**, 1–146 (1986).
- [3] FTB. Pérez and JM. Matera, ArXiv 2307.08683 (Preprint, 2024).

# Estudio de la anisotropía magnética del TiO<sub>2</sub> (anatasa) debido a efectos estructurales: Importancia del Acoplamiento Espín-Órbita en DFT

J. A. ZÚÑIGA<sup>1,2</sup>, A. M. MUDARRA NAVARRO<sup>1,2</sup>, A. V. GIL REBAZA<sup>1,2</sup>

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

<sup>2</sup> Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas (FCE), Universidad Nacional de La Plata (UNLP), La Plata, Argentina

email: [jzuniga@iflp.unlp.edu.ar]

En este trabajo se estudia el magnetismo d<sup>0</sup> en el sistema TiO<sub>2</sub> (anatasa) considerando efectos estructurales dados por el dopaje con H (sustitución catiónica) y vacancias de O o Ti. Se pretende determinar la anisotropía magnética y el eje fácil de magnetización por medio de magnetismo no colineal dado por el Acoplamiento Espín-Órbita (SOC).

Los cálculos ab-initio se realizaron en el marco de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), considerando SOC y efectos relativistas. Las ecuaciones autoconsistentes de Kohn-Sham se resolvieron utilizando el método de ondas planas y pseudopotenciales (QuantumEspresso). La parte de intercambio-corrección se describió utilizando la parametrización PBE de la Aproximación de Grado Generalizado (PBE-GGA) [1].

Para el modelo teórico descrito se obtuvo que la energía de formación más estable se presenta cuando hay sustitución de O por H. Además, la magnetización proviene de la polarización de espín y de una contribución orbital. En consecuencia, irradiar con iones (H) permite la creación reproducible de una cierta densidad de defectos y desencadena Magnetismo Inducido por Defectos (DIM) de manera controlada, lo cual es necesario para sus aplicaciones en espintrónica [2].

# Determinación del momento cuadrupolar nuclear del $^{49}\text{Ti}$ y $^{47}\text{Ti}$ a partir de la Teoría de la Funcional Densidad

H. K. NARRO ARIAS<sup>1,2</sup>, L. A. ERRICO<sup>1,3</sup>, A. V. GIL REBAZA<sup>1,2</sup>

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

<sup>2</sup> *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas (FCE), Universidad Nacional de La Plata (UNLP), La Plata, Argentina*

<sup>3</sup> *Universidad Nacional del Noreste de la Pcia. de Bs. As. (UNNOBA), Pergamino, Argentina*

email: [hnarro@iflp.unlp.edu.ar]

En el presente trabajo se ha obtenido, a partir de cálculos basados en el teorema de la funcional densidad (DFT), el tensor del gradiente de campo eléctrico (EFG) en sitios Ti de diferentes compuestos de Ti. Estos resultados han sido contrastados con datos experimentales de la frecuencia cuadrupolar ( $\nu_Q$ ) obtenidas de la literatura[1] para determinar los valores del momento cuadrupolar nuclear (Q) para los estados de spin, ambos en el estado fundamental, 7/2 del  $^{49}\text{Ti}$  y 5/2 del  $^{47}\text{Ti}$ .

Los cálculos han sido realizados usando dos métodos diferentes pero complementarios: el Full-Potential Augmented Plane-Wave (FP-LAPW, Wien 2k) y el Plane-Wave plus Pseudopotentials + Gauge-Including Projected Augmented Waves (GIPAW, Quantum Espresso).

Los resultados obtenidos están en concordancia con los valores experimentales reportados y nos permiten discutir la barra de error en  $Q(^{49}\text{Ti})$  y  $Q(^{47}\text{Ti})$ , y el efecto de la aproximación para el término de correlación e intercambio en estas magnitudes.

# Propiedades de transporte y transiciones de fase cuántica en heteroestructuras unidimensionales SC-SM-FMI

J. FEIJOO<sup>1,2</sup>, A. IUCCI<sup>1,2</sup>, A. LOBOS<sup>3,4</sup>

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

<sup>2</sup> Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas (FCE), Universidad Nacional de La Plata (UNLP), La Plata, Argentina

<sup>3</sup> Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Cuyo, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Mendoza, Argentina

<sup>4</sup> Instituto Interdisciplinario de Ciencias Básicas(ICB), UNCuyo-CONICET, Mendoza, Argentina  
email: [javier.feijoo@fisica.unlp.edu.ar]

Proponemos un nanodispositivo electrónico unidimensional inspirado en heteroestructuras híbridas de semiconductor-superconductor-aislante ferromagnético (SE-SC-FMI) e investigamos sus propiedades de transporte a temperatura cero. Aunque estudios previos se han centrado en generar superconductores topológicos con fermiones de Majorana, proponemos una aplicación alternativa: explorar transiciones de fase cuántica (QPT) controlables mediante mediciones de transporte. Nuestro estudio destaca dos diferencias clave con respecto a dispositivos existentes:

- La longitud de la capa FMI es más corta que la de la heteroestructura SE-SC, introduciendo una interacción de Zeeman inhomogénea que afecta los estados ligados de Andreev (ABS).
- Nos enfocamos en nanocables semiconductores con mínima o nula interacción espín-órbita de Rashba, lo que permite la inducción de ABS polarizados en espín y estados cuánticos de alto espín en el estado fundamental.

Mostramos que el dispositivo describe transiciones de fase cuántica (QPT) al modificar la longitud de la capa FMI y/o aplicar un voltaje global, observando cruces de energía cero de los estados ligados de Andreev (ABS) subgap como firma de estas transiciones. Nuestros hallazgos sugieren que estos efectos son accesibles experimentalmente y ofrecen una plataforma robusta para estudiar transiciones de fase cuántica en nanocables híbridos.

Describimos el sistema mediante un Hamiltoniano discreto unidimensional que consta de tres partes. La parte central  $H_0^w$  de longitud finita  $L_M$ , describe la interfaz de los tres elementos SC-SM-FMI.

$$H_0^w = -t \sum_{j=1,\sigma}^{N-1} (c_{j,\sigma}^\dagger c_{j+1,\sigma} + \text{H.c.}) + \sum_{j=1,\sigma}^N \left[ -\mu c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + \Delta (c_{j,\uparrow}^\dagger c_{j,\downarrow}^\dagger + \text{H.c.}) \right] - \frac{h_0}{2} \sum_{j=2}^{N-1} (c_{j,\uparrow}^\dagger c_{j,\uparrow} - c_{j,\downarrow}^\dagger c_{j,\downarrow}). \quad (1)$$

La segunda parte consiste en cadenas SC-SM semi-infinita acopladas a los extremos del sistema central, evitando así efectos de tamaño finito. Finalmente, acoplamos contactos normales a una

distancia  $\Delta L$  de la capa FMI. En estos contactos se medirá la conductancia local y no local del sistema.

El formalismo de Dyson-Keldysh para sistemas fuera de equilibrio nos permite describir la conductancia en términos de los elementos de la estructura de Nambu de las funciones de Green retardadas del sistema completo.

$$G_{LL}(\omega, \mu) = \frac{4e^2}{h} \gamma_L \sum_{\sigma} \left\{ -\text{Im} [G_{1,1}^r(\omega, \mu)] + \gamma_L \left( -|G_{1,1;\sigma}^r(\omega, \mu)|^2 + |F_{1,1;\sigma}^r(\omega, \mu)|^2 \right) \right\} \Big|_{\omega=-\mu_L}, \quad (2)$$

$$G_{LR}(\omega, \mu) = \frac{4e^2}{h} \gamma_L \gamma_R \sum_{\sigma} \left( -|G_{1,N;\sigma}^r(\omega, \mu)|^2 + |F_{1,N;\sigma}^r(\omega, \mu)|^2 \right) \Big|_{\omega=-\mu_R}, \quad (3)$$

Vemos que la conductancia está en función del potencial químico  $\mu$ , el cual puede ser controlado experimentalmente por el potencial  $V_{BG}$ , y  $\omega$  que depende de  $V_{\alpha}$ . Los resultados muestran cómo los niveles de conductancia avanzan hacia  $\omega = 0$  cuando se incrementa  $L_M$ . Esto permite encontrar regiones de  $\mu$  donde los estados ABS cruzan el nivel de energía cero, describiendo transiciones de fase cuántica (QPT), las cuales están representadas por el spin total  $S_z$  del estado fundamental.

## Referencias

- [1] J. Feijoo, A. Iucci, and A. M. Lobos. *Subgap states and quantum phase transitions in one-dimensional superconductor–ferromagnetic insulator heterostructures*. Phys. Rev. B **107**, 214505 (2023). doi:10.1103/PhysRevB.107.214505.
- [2] S. Vaitiekėnas, R. Seoane Souto, Y. Liu, P. Krogstrup, K. Flensberg, M. Leijnse, and C. M. Marcus. *Evidence for spin-polarized bound states in semiconductor–superconductor–ferromagnetic insulator islands*. Phys. Rev. B **105**, L041304 (2022). doi:10.1103/PhysRevB.105.L041304.

# Efectos de interacciones electrodébiles de corrientes neutras en dispersión inelástica profunda del protón desde la teoría de supercuerdas

J. CHAVES<sup>1</sup>, M. SCHVELLINGER<sup>1</sup>, D. JORRÍN<sup>2,3,4</sup>

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

<sup>2</sup> Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas (FCE), Universidad Nacional de La Plata (UNLP), La Plata, Argentina

<sup>3</sup> Universidad Nacional Arturo Jauretche (UNAJ), Florencio Varela, Argentina

<sup>4</sup> Universidad Católica Argentina (UCA), Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Argentina

email: [jchaves@iflp.unlp.edu.ar]

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

Las funciones de estructura se obtienen experimentalmente y es posible estudiarlas utilizando la dualidad AdS/CFT. Para el caso de DIS para un haz de electrones con un blanco de protones, se obtiene el pomerón BPST que permite describir a la función de estructura  $F_2$ . En trabajos posteriores, se ha obtenido la función de estructura antisimétrica  $g_1$ . Ambas fueron utilizadas para ajustar datos experimentales, obteniendo para la  $F_2$  (utilizando 4 parámetros) en el rango de  $0 \leq x \leq 0,01$  un  $\chi^2 = 1,086$  para 280 datos, mientras que para el rango de  $0,01 \leq x \leq 0,1$  se obtuvo un  $\chi^2 = 1,10$  para 236 datos, correspondientes a distintas colaboraciones, entre ellas H1-ZEUS. Estos datos se encuentran en el rango electromagnético, ya que  $Q^2 \leq 400 \text{ GeV}^2$ . El mismo estudio se realizó para la función de estructura antisimétrica  $g_1$  para 56 puntos (utilizando un solo parámetro) con un  $\chi^2 = 1,14$  en el rango de  $0,0036 \leq x \leq 0,009$  y  $0,062 \text{ GeV}^2 < Q^2 < 2,41 \text{ GeV}^2$ .

Los cálculos holográficos de las funciones de estructura se limitan al caso electromagnético. Se puede suponer, por argumentos de teoría de grupos, que la forma funcional obtenida para la  $F_2$  y  $g_1$  es la misma para el rango electrodébil. Bajo esta suposición, se realizó el ajuste para la función de estructura  $F_2$  entre  $0 < Q^2 < 3000 \text{ GeV}^2$  y  $0,01 \leq x \leq 0,1$  para 282 datos con un  $\chi^2 = 1,105$ . También se estudió a la función de estructura  $xF_3$ , que sólo tiene componente electrodébil, utilizando que  $F_3 = 2g_1$ . Con esto, se realizó un ajuste en el rango de  $1000 \text{ GeV}^2 < Q^2 < 8000 \text{ GeV}^2$  y  $0,01 \leq x \leq 0,1$  para 24 datos (correspondientes a la colaboración H1-ZEUS) con un  $\chi^2 = 1,019$ .

# Estructura y propiedades electrónicas, térmicas y de transporte de materiales calcogenuros basados en Te para aplicaciones termoeléctricas: Un abordaje de primeros principios

S. L. CHUCCHUCAN GONZALEZ<sup>1,2</sup>, A. MUDARRA<sup>1,2</sup>, L. ERRICO<sup>1,2,3</sup>

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

<sup>2</sup> Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas (FCE), Universidad Nacional de La Plata (UNLP), La Plata, Argentina

<sup>3</sup> Universidad Nacional del Noreste de la Pcia. de Bs. As. (UNNOBA), Pergamino, Argentina

email: [chuchucan@iflp.unlp.edu.ar]

Las tecnologías de energía actuales, dependientes de combustibles fósiles, impactan negativamente el medio ambiente. Los materiales termoeléctricos (TE) ofrecen una solución sostenible al convertir calor en electricidad. La eficiencia de estos materiales se mide con el parámetro  $ZT$ , que depende del coeficiente de Seebeck, la resistividad eléctrica, la temperatura y la conductividad térmica. Para optimizar el rendimiento TE, es crucial ajustar el nivel de Fermi, que se puede regular mediante el dopaje.

Entre los materiales con potencial aplicación como TE, los compuestos basados en Ge-Te destacan por sus altos valores de  $ZT$  en el rango de temperatura media [1]. Si bien el TeGe es un material prometedor, la presencia de vacancias intrínsecas de Ge conduce a una alta concentración de huecos y estabilidad térmica deficiente [1]. El dopaje controlado reduce la concentración de huecos, pero deteriora la movilidad de los portadores. TeGe experimenta una transición de fase cúbica a romboédrica por debajo de 700 K [1]. La fase romboédrica tiene menor concentración de vacancias de Ge, buena estabilidad térmica y reproducibilidad del rendimiento TE, permitiendo ajustar la concentración de vacancias mediante recocido y dopaje controlado [1].

Este estudio presenta un análisis DFT de las propiedades estructurales, electrónicas, de transporte y termoeléctricas de TeGe dopado con Sn y Sb, considerando vacancias de Te y Ge en fases cristalinas cúbica. Utilizamos métodos FP-LAPW para simular la dilución de dopantes y vacancias con superceldas que reproducen concentraciones experimentales. Las propiedades de transporte se calcularon con el modelo de banda rígida [2] y las ecuaciones de transporte de Boltzmann [3, 4], implementadas en BoltzTraP. Como resultado de estos cálculos, se ha logrado estabilizar el sistema TeGe con vacancias ubicadas en la red del Ge; además, el dopaje con Sb y Sn ha permitido mejorar el rendimiento termoeléctrico obteniendo valores de  $ZT$  alrededor de 2 a una aproximada de  $T = 700K$ .

## Referencias

- [1] M. Zhang. *Advanced functional materials.* Adv. Funct. Mater. **34**, 2307864 (2024). doi:10.1002/adfm.202307864.

- [2] M.-S. Lee and S. D. Mahanti. *Density-functional study of thermoelectric properties*. Phys. Rev. B **85**, 165149 (2012). doi:10.1103/PhysRevB.85.165149.
- [3] L. Xu, H.-Q. Wang, and J.-C. Zheng. *Electronic structure and thermoelectric properties of half-Heusler compounds*. J. Electron. Mater. **40**, 641 (2011). doi:10.1007/s11664-010-1453-9.
- [4] V. K. Gudelli, et al. *Investigation of electronic structure and optical properties in semiconductors*. J. Phys. Chem. C **117**, 21120 (2013). doi:10.1021/jp408109x.