

LIBRO DE RESÚMENES

CLACIM 2022

X CONFERENCIA LATINOAMERICANA DE
COLISIONES INELÁSTICAS EN LA MATERIA

23-26 DE OCTUBRE

Salta Argentina



Organizan



UNIVERSIDAD NACIONAL
DE SALTA

Mi sabiduría viene de esta tierra



en colaboración con



IAEA

Organismo Internacional de Energía Atómica

Átomos para la paz y el desarrollo

Auspician



AGENCIA
NACIONAL DE PROMOCION
CIENTIFICA Y TECNOLÓGICA



CONICET



X CONFERENCIA LATINOAMERICANA DE COLISIONES INELÁSTICAS EN LA MATERIA

Comité Asesor Científico

Néstor Arista (CAB, Argentina)
Remigio Cabrera-Trujillo (UNAM, México)
Nelson de Castro Faría (UFRJ, Brasil)
Enio Da Silveira (PUC, Brasil)
Pedro Grande (UFRGS, Brasil)
Maria Silvia Gravielle (IAFE, Argentina)
Claudia Montanari (IAFE, Argentina)
Eduardo Montenegro (UFRJ, Brasil)
Roberto Rivarola (IFIR, Argentina)
Jorge Valdés (UTFSM, Chile)
Paraskevi Dimitriou (IAEA)

Organización

Marcelo Fiori (UNSa, Salta)
Maria Silvia Gravielle (IAFE, Buenos Aires)
Claudia Montanari (IAFE, Buenos Aires)
Diego Arbó (IAFE, Buenos Aires)
Darío Mitnik (IAFE, Buenos Aires)

Comité Organizador Local

Marcelo Fiori (UNSa, Salta)
Claudia Montanari (IAFE, Buenos Aires)
Maria Silvia Gravielle (IAFE, Buenos Aires)
Diego Arbó (IAFE, Buenos Aires)
Darío Mitnik (IAFE, Buenos Aires)
Jorge Miraglia (IAFE, Buenos Aires)
Alejandra Mendez (IAFE, Buenos Aires)
Claudio Archubi (IAFE, Buenos Aires)
Jesica Peralta (IAFE, Buenos Aires)
Sebastián López (IAFE, Buenos Aires)

Cena en Peña La Vieja Estación: Balcarce 875



Almuerzo en El Charrúa:
Gral. Martín de Güemes 186



La Usina Cultural: España 1-98

CLACIM 2022

PROGRAMA CLACIM Octubre 2022

23-26 octubre, Salta, Argentina

	Domingo 23	Lunes/Segunda-feira 24	Martes/Terça-feira 25	Miércoles/Quarta-feira 26	Jueves/Quinta-feira 27	Viernes/Sexta-feira 28
8:00		Inscripciones			Excursiones	Excursiones
8:30		Apertura	Inscripciones			
9:00			Chair: Pedro Grande	Chair: Darío Mitnik		
9:20		Chair: Eduardo Montenegro Johnny Días Juan Monti Moana Astigarreta	Néstor Arista Claudio Archubi Caroline Seabra	Enio Da Silveira Aline Medina Jorge Basilio		
10:20			Coffee Break	Coffee Break		
10:40		Coffee Break	& Posters	& Posters		
11:10		Chair: María Silvia Gravielle Fabio Busnengo Gisela Bocan Paulo Fichtner	Chair: Claudia Montanari Eduardo Alves Alejandra Mendez Eduardo Pittham	Chair: Roberto Rivarola Raúl Barrachina Sebastián López Mariel Galassi		
12:30		ALMUERZO	ALMUERZO	ALMUERZO		
14:30		Chair: Diego Arbó Guillaume Laurent Diego Boll Louise Etcheverry	Tour por la ciudad y ascenso al Cerro San Bernardo	Chair: Ginette Jalbert Marcelo Sant'Anna Silvina Seguí Henrique Trombini		
15:50		Coffee Break		Coffee Break		
16:20		& Posters		Chair: Jorge Miraglia Nikolaus Stolterfoht		
16:50		Chair: Marcelo Fiori Pablo Fainstein Lucas Sigaud		Roberto Garibotti		
16:50		Maximiliano Baldiviezo		Clausura		
19:00	Recepción e inscripción	Charla Abierta: Jorge Miraglia				
20:30			Cena de la Conferencia			

Programa

Domingo 23 de octubre: Recepción y Acreditación

La conferencia se desarrollará en la Usina Cultural, calle España 1-98, Salta. Allí nos reuniremos el domingo 23 a las 19.00 hs. para la recepción y acreditación, y será el centro de nuestras actividades los tres días completos



Programa

Lunes 24 de octubre

8:00-8:30	Acreditaciones
8:30-9:20	Apertura
Chair: <i>E. Montenegro</i>	Sesión 1
9:20-9:50	<i>Seções de choque de produção de raios X da camada K de Ti, Cr, Ni e Zn induzidas por íons de cloro</i> Johnny Días , UFRGS Porto Alegre, Brasil
9:50-10:15	<i>Descripción teórica de la irradiación de la materia biológica con haces de iones</i> J. Monti , IFIR, Rosario, Argentina
10:15-10:45	<i>Medida da temperatura do H_3^+ produzido na reação $H_2^+ + H_2$</i> Moana Astigarreta , UFF Niterói, Brasil
10:45-11:20	Coffee Break
Chair: <i>M.S. Gravielle</i>	Sesión 2
11:10-11:50	<i>Estudio de la dinámica de procesos fisicoquímicos sobre superficies a partir de cálculos de primeros principios y aprendizaje automatizado</i> F. Busnengo , IFIR Rosario, Argentina.
11:50-12:15	<i>Efectos dinámicos y contribuciones de van der Waals en la difracción de átomos rápidos en incidencia rasante</i> G. Bocan , CAB Bariloche, Argentina
12:15-12:35	<i>Elastic and inelastic electron scattering experiments on shape evolution of Au and CdSe thin films</i> P. Fichtner , UFRGS Porto Alegre, Brasil
12:35-14:30	Almuerzo en El Charrúa (Paseo Güemes)
Chair: <i>D. Arbó</i>	Sesión 3
14:30-15:00	<i>Electron choreography at the attosecond time scale</i> G. Laurent , Auburn University, USA
15:00-15:25	<i>Procesos multifotónicos ultrarrápidos en átomos</i> D. Boll , IFIR Rosario, Argentina
15:25-15:50	<i>Caracterização eletrônica e estrutural de nanopartículas de Au</i> L. Etcheverry , UFRGS Porto Alegre, Brasil
15:30-16:50	Coffee Break & Posters (1-15)
Chair: <i>M. Fiori</i>	Sesión 4
16:50-17:15	<i>Separación isotópica de litio por láser para aplicaciones nucleares</i> P. Faistein , CAB Bariloche, Argentina

17:15-17:40	<i>Seleção isotópica na produção de dicátions metaestáveis de benzeno</i> L. Sigaud , UFF Niterói, Brasil
17:40-18:05	<i>Historia del Taller "La Física al Alcance de Todos - Prof. Daniel Córdoba"</i> M. Baldiviezo , UNSa Salta, Argentina
19:00-20:00	Charla Abierta: Principio (y fin) de la Tabla Periódica Jorge Miraglia , IAFE Buenos Aires, Argentina

Martes 25 de octubre

08:30-09:00	Acreditaciones
Chair: P. Grande	Sesión 5
09:00-09:30	<i>Modelo variacional para estructura electrónica y factores de forma de iones y átomos desde He hasta Ne</i> N. Arista , CAB Bariloche, Argentina
09:30-09:55	<i>Modelo unificado de paquete de onda para interacciones de partículas en blancos fríos y plasmas</i> C. Archubi , IAFE Buenos Aires, Argentina
09:55-10:20	<i>Medindo poder de frenagem de $^{12}\text{C}^+$ e $^{16}\text{O}^+$ em filmes finos de carbono utilizando o SSAMS-UFF</i> C. Seabra , UFF Niterói, Brasil
10:20-11:10	Coffee Break & Posters (16-30)
Chair: C. Montanari	Sesión 6
11:10-11:40	<i>Determinação das secções eficazes nucleares de ^1H e ^3He em ^9Be na gama de energias de 0.5–2.35 MeV</i> E. Alves , Universidade de Lisboa, Portugal
11:40-12:05	<i>Aprendizaje automático en Stopping Power: datos y modelos</i> A. Mendez , IAFE Buenos Aires, Argentina
12:05-12:30	<i>Perda de energía de íons leves em materiais candidatos para futura geração de reatores de fusão nuclear</i> E. Pittham , Uppsala University, Suecia
12:30-14:30	Almuerzo en El Charrúa (Paseo Güemes)
14:30-18:30	Tour por la ciudad con ascenso al Cerro San Bernardo
20:30	CENA DE LA CONFERENCIA Peña La Vieja Estación: Balcarce 875

Miércoles 26 de octubre

Chair: D. Mitnik	Sesión 7
09:00-09:30	<i>Irradiação de materiais astrofísicos por íons e elétrons: : simulações em laboratório</i> E. da Silveira , PUC-Rio Río de Janeiro, Brasil
09:30-09:55	<i>Fotofragmentação e Fotoionização do CH₂FCF₃ na Valência e na Borda do Carbono</i> A. Medina , UFRJ Río de Janeiro, Brasil
09:55-10:20	<i>Impacto de elétrons em gases e filmes moleculares condensados de benzeno e nitrilas: implicações em Titã</i> J. Basilio , UFRJ Río de Janeiro, Brasil
15:20-11:10	Coffee Break & Posters (30-45)
Chair: R. Rivarola	Sesión 8
11:10-11:40	<i>Trascendiendo la aproximación "parámetro de impacto" en colisiones atómicas por impacto de proyectiles pesados</i> R. Barrachina , CAB Bariloche, Argentina
11:40-12:05	<i>Todo es cuestión de fases: retardos temporales y hologramas en la fotoionización</i> S. López , IAFE Buenos Aires, Argentina
12:05-12:30	<i>Cálculo de secciones eficaces de ionización múltiple de moléculas tipo Ne por impacto de iones livianos: H₂O y CH₄</i> M. Galassi , IFIR Rosario, Argentina
12:30-14:30	Almuerzo en El Charrúa (Paseo Güemes)
Chair: G. Jalbert	Sesión 9
14:30-15:00	<i>Síntese de nanoestruturas induzida por feixes de íons de poucos keV</i> M. Sant'Anna , UFRJ Río de Janeiro, Brasil
15:00-15:25	<i>Interacción de partículas cargadas con materiales bidimensionales modelados como osciladores electrónicos</i> S. Seguí , IFEG Córdoba, Argentina
15:25-15:50	<i>Structural characterization of a Pt ultra-thin films by electron and ion based</i> H. Trombini , UFCS Porto Alegre, Brasil
15:50-16:20	Coffee Break
Chair: J. Miraglia	Sesión 10
16:20-16:50	<i>Guiding of highly charged ions through capillaries in insulating materials: experiments and simulations</i> N. Stolterfoht , HZB Berlín , Alemania
16:50-17:30	<i>Ciencia y Técnica en el Río de La Plata del Virreinato a la Independencia</i> R. Garibotti , IB Bariloche, Argentina
17:30-18:00	Clausura

Lista de Posters

1. <i>Quantum interferences govern phase delays in ω-2ω strong field ionization</i> Diego G. Arbó y Sebastián D. López
2. <i>Fragmentação de moléculas aromáticas sob colisão de He^{2+}: revisita experimental e teórica</i> Wania Wolff, Volker Dangendorf, Gehard Hilgers, Ulrich Giesen, Jorge H. Basilio, Lucia H. Coutinho, Fabio A. Ribeiro, Alejandra Mendez, Sebastian Lopez y Claudia Montanari
3. <i>Aromatic molecules revisited under H^+ and He^{2+} collision: theory and experiment</i> Wania Wolff, Jorge H. Basilio, Volker Dangendorf, Gehard Hilgers, Ulrich Giesen, Lucia H. Coutinho, Fabio A. Ribeiro, Alejandra Mendez, Sebastian Lopez y Claudia Montanari
4. <i>As potencialidades do ultrassom como alternativa ao ataque químico para microestruturas escrita por feixes de prótons</i> Deiverti de Vila Bauer, Rafaela Debastiani, Claudia Telles de Souza, Livio Amaral y Johnny Ferraz Dias
5. <i>Ion irradiation effects in InGaSb films</i> C. A. Bolzan, L.T.Rossetto y R. Giulian
6. <i>Develando plasmones de superficie en el MoS_2</i> P. Buitrago, S. Montoro, S. Rodríguez, E. Albanesi, G. Ruano, R. Vidal, and F. Bonetto
7. <i>Radiólise de valina por elétrons de keV</i> C.A.P da Costa y E. F. da Silveira
8. <i>Estudo da radiólise de moléculas sólidas de n_2o por espectroscopia de infravermelho</i> R.C. Pereira, A.L.F. de Barros y E.F.da Silveira
9. <i>Emisión de iones secundarios inducida por fragmentos de fisión de mezclas de gases condensados en hielo de agua</i> P. R. B. Oliveira, R. Martinez y E. F. da Silveira
10. <i>Ionización de moléculas de agua líquida por impacto electrónico</i> M. L. de Sanctis, M-F. Politis, R. Vuilleumier y O. Fojón
11. <i>Apantallamiento dinámico en proyectiles iónicos y emisión electrónica de encuentro binario</i> N. J. Esponda, M. A. Quinto, R. D. Rivarola y J. M. Monti
12. <i>Efectos de la interacción electrón-electrón en la ionización de He por impacto de Li^{1+} 1s2s y 1s2p</i> N. J. Esponda, M. A. Quinto, R. D. Rivarola y J. M. Monti

13. <i>Correlación entre la captura electrónica al continuo y la configuración electrónica de los proyectiles</i> N. J. Esponda, M. A. Quinto, R. D. Rivarola y J. M. Monti
14. <i>Efeitos de bunching no stragglings eletrônico de H e He na matéria</i> F.F. Selau, A. Molling, H. Trombini, R.C. Fadanelli, M. Vos e P.L. Grande
15. <i>Imaging and Analysis of Human Glioblastoma U87 Cells Treated with Cisplatin by μ-PIXE</i> Henrique Fonteles, P. L. Grande, J. F. Dias, Deiverti Bauer, Karine Begnini, Julia Marcolin y Guido Lenz
16. <i>Influencia de defectos superficiales en patrones GIFAD</i> L. Frisco y M. S. Gravielle
17. <i>Decoherencia por efecto de fonones en colisiones átomo-superficie</i> L. Frisco y M. S. Gravielle
18. <i>Estudio de parámetros físicos relevantes en la dosimetría de referencia para Hadronterapia: poderes de frenado y valores w en aire</i> V. B. Tessaro, M. E. Galassi, B. Gervais y M. Beuve
19. <i>Transferencia de carga en colisiones H^+-grafeno : efecto de la presencia de adsorbatos alcalinos</i> M. A. Romero, F. Bonetto y E. A. García
20. <i>Fragmentos e agregados iônicos de acetonitrila e metanol em fase condensada por impacto de elétrons energéticos</i> André M. R. Giralaldi, Jorge H. Basílio, Michelle Baschin, Fabio Ribeiro e Wania Wolff
21. <i>Non-linear ion stopping calculations for a classical free-electron gas</i> P. L. Grande and R. C. Fadanelli
22. <i>Vórtices en colisiones de ionización por impacto de iones Pesados</i> T. A. Guarda y R. O. Barrachina
23. <i>Ionización por pulsos láser: el efecto de los potenciales de corto alcance en las estructuras holográficas</i> J. A. Guzmán, I. C. Ramos, D. G. Arbó y S. D. López
24. <i>Espectroscopía de emisión de rayos X $K\beta$ de alta resolución para el estudio del entorno químico</i> S. Limandri y G. Tirao
25. <i>Bombardeio de Glicina e Fenilalanina por Partículas α (keV) Dependência da Seção de Choque de Destruição com Energia e Temperatura</i> I. Ulrichsen, R. Martinez y E. F. da Silveira
26. <i>Degradation of phenylalanine at room temperature by MeV ions</i> Christian Mejía, Cíntia A. P. Da Costa y E. F. da Silveira

27. <i>Irradiation effects induced in solid carbon oxide by swift heavy ions</i> C. Mejía, H. Rothard y P. Boduch
28. <i>Determinación de la entropía de Shannon en los procesos de captura electrónica de iones con átomos de hidrógeno</i> J. E. Miraglia
29. <i>Las secciones eficaces teóricas de captura e ionización, y experimentales de frenamiento satisfacen la ley de Benford</i> J. E. Miraglia y M. S. Gravielle
30. <i>Revisión de los últimos veinte años de stopping power de iones en la materia: presente y futuro de la base de datos de IAEA</i> Claudia C. Montanari, Felipe Bivort Haiek y Paraskevi Dimitriou
31. <i>O uso de redes neurais convolucionais para análise de espectros MEIS</i> V. G. Oliveira, T. F. Silva, B. Konrad, F. Selau, H. Trombini y P. L. Grande
32. <i>La Función Dieléctrica de Levine-Mermin para describir la pérdida de energía de blancos multielectrónicos</i> J. P. Peralta, M. Fiori, A. M. P. Mendez, C. C. Montanari
33. <i>Poder de frenado, de La a Lu</i> J. P. Peralta, A. M. P. Mendez y C. C. Montanari
34. <i>Estudio de Funciones Dieléctricas para Aluminio</i> J. P. Peralta y M. Fiori
35. <i>Técnicas de Análisis por Haces de Iones en el Acelerador de Iones Tándem 1,7 MV del Centro Atómico Bariloche</i> G. Anibal, C. Olivares, G. Ruano Sandoval, L. Rodríguez y P. D. Pérez
36. <i>Formação e análise da estabilidade de íons duplamente carregados metaestáveis de moléculas aromáticas</i> Amir L. Perlin, Ricardo R. O. Junior y Wania Wolff
37. <i>Radiólise de bases nitrogenadas de DNA irradiadas por elétrons de keV à diferentes temperaturas</i> V. P. Rego, E.F. da Silveira e C. A. P. da Costa
38. <i>Modelo de potencial separable aplicado a ionización de Hidrógeno por campo intenso</i> V. D. Rodríguez
39. <i>Carga dinámica efectiva en el continuo del modelo CDW-EIS para ionización simple en colisiones ión-átomo: dependencia angular y energética</i> M. F. Rojas, M. A. Quinto, R. D. Rivarola y J. M. Monti
40. <i>Ionización de moléculas por impacto de iones desnudos: carga dinámica efectiva en el continuo del blanco</i> M.F. Rojas , M.A. Quinto, N.J. Esponda, R.D. Rivarola y J.M. Monti

41. <i>Nanopartículas de Ag embebidas modificadas por feixe de Ne^+</i> B. Konrad, F. F. Selau, H. Trombini, P. F. P. Fichtner y P. L. Grande
42. <i>Secciones eficaces de procesos inelásticos por impacto de protones sobre bases del ADN y ARN. Aplicación al cálculo de Stopping Power</i> C. Strubbia, V. Tessaro y M. E. Galassi
43. <i>Fotoionización asistida por campos no homogéneos</i> R. Della Picca, S. López, M. Ciappina, J. M. Randazzo y D. Arbó
44. <i>Intercambio de carga en colisiones de Li^+ dispersados por una superficie de grafeno en presencia de K adsorbido</i> M. A. Romero, F. Bonetto y E. A. García
45. <i>Ion tracks in ultrathin polymer films: The role of the substrate</i> R. M. Papaléo, R. S. Thomaz, I. Alencar, P.L. Grande, C. Trautmann

RESÚMENES DE LAS CHARLAS

Seções de choque de produção de raios X da camada K de Ti, Cr, Ni e Zn induzidas por íons de cloro

F. Fernandes¹, L. Amara¹, P. L. Grande¹, J. F. Dias^{1*}

¹Laboratório de Implantação Iônica, IF-UFRGS, Porto Alegre, Brasil

Seções de choque totais de produção de raios X induzidos por partículas carregadas possuem um papel importante para espectrometrias que utilizam raios X. No caso de feixes de íons energéticos, uma base de dados consistente para seções de choque de produção de raios X induzidas por prótons e partículas alfa está disponível na literatura científica. Por outro lado, dados para íons pesados são poucos e, em geral, o acordo entre resultados experimentais e modelos teóricos é relativamente pobre para algumas combinações íon-alvo em regimes de energia particulares.

Neste trabalho mostramos os resultados das seções de choque totais de produção de raios X da camada K dos elementos Ti, Cr, Ni e Zn induzidas por íons Cl^{4+} e Cl^{5+} na faixa de energia entre 4 MeV e 10 MeV. Para atingir tal objetivo, filmes finos desses materiais foram depositados sobre placas de carbono vítreo. Íons energéticos de cloro foram produzidos por um acelerador Tandatron de 3 MV de terminal. Os raios X induzidos nos experimentos foram detectados por um detector do tipo Si(Li).

Os resultados experimentais foram comparados com cálculos de canais acoplados (CC). Neste caso, a evolução temporal dos elétrons da camada K dos alvos foi calculada através da resolução da equação de Schrodinger dependente do tempo para cada parâmetro de impacto dos projéteis em uma base truncada.

As seções de choque de produção de raios X experimentais variam desde 10^{-2} barns para o Ti até 10^2 barns para o Zn. Os resultados obtidos para o Ti indicam que os cálculos de canais acoplados subestimam as seções de choque ex-

perimentais em três ordens de magnitude para a energia de cloro de 10 MeV (Figura 1). Por outro lado, os cálculos CC superestimam as seções de choque experimentais do cromo. Em geral, a discrepância entre teoria e experimento decresce a medida que a energia dos projéteis aumenta (Figura 2).

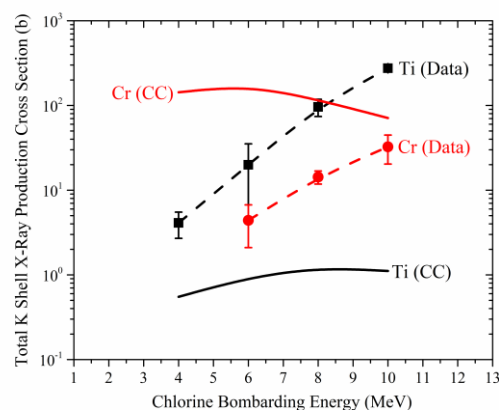


Fig. 1. Seções de choque experimentais de Ti e Cr e respectivos resultados de canais acoplados.

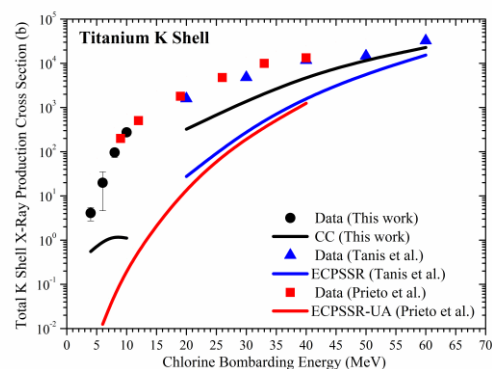


Fig. 2. Seções de choque experimentais de Ti e respectivos resultados de canais acoplados (CC) e teoria ECPSSR de Brandt e Lapicki

* E-mail: jfdias@if.ufrgs.br

Descripción teórica de la irradiación de materia biológica con haces de iones

J. M. Monti* ¹

* Instituto de Física Rosario (Conicet-UNR), Rosario, Argentina

El estudio de la interacción de la radiación con la materia resulta de enorme interés en diferentes ámbitos de la ciencia y la técnica. Particularmente, en lo que refiere interacción de radiación con la materia viva, entender los efectos inducidos por la radiación a un nivel celular es de principal importancia a la hora de predecir la evolución de organismos vivos irradiados. De esta manera, ya sea en el área de la radiobiología para identificar las lesiones críticas en el ADN o en medicina para adaptar los tratamientos radioterapéuticos, se necesita un conocimiento preciso de las numerosas interacciones inducidas por las partículas cargadas en el tejido vivo. A este fin, los códigos Monte-Carlo para la simulación de traza de iones representan las herramientas más apropiadas y poderosas, en particular para modelar la completa desaceleración y deposición de energía de las partículas ionizantes en el medio biológico. Sin embargo, es necesario mencionar que tales códigos computacionales resultan confiables solamente si las bases de datos de entrada utilizadas para modelar las interacciones entre las partículas cargadas y los componentes del medio son precisas y completas. Para la confección de estas bases de datos resultan necesarias secciones eficaces múltiple y simple diferenciales y totales para todas las reacciones involucradas (captura electrónica y emisión electrónica simple y múltiple, excitación, etc.) entre las partículas primarias (haz incidente) y secundarias (producidas en las interacciones) con los elementos constitutivos del medio. La literatura reporta varios códigos numéricos para la simulación del transporte de protones y electrones en un medio constituido por agua, siendo ésta comúnmente utilizada como sustituto para el medio vivo. Además las secciones eficaces utilizadas para la confección de las bases de

datos suelen ser obtenidas a partir de modelos semi empíricos.

Durante los últimos años hemos trabajado en el desarrollo de un código Monte-Carlo llamado TILDA-V basado en un conjunto de secciones eficaces mecánico cuánticas para todas las interacciones por electrones, protones, hidrógeno e iones de helio tanto en agua como en las nucleobases del ADN y el esqueleto azúcar-fosfato [1, 2].

En este trabajo, mostraré detalles de los diferentes modelos teóricos y utilizados para la determinación de las secciones eficaces involucradas en la interacción de iones pesados desnudos y parcialmente vestidos con las moléculas que conforman el tejido vivo y su inclusión en el código TILDA-V.

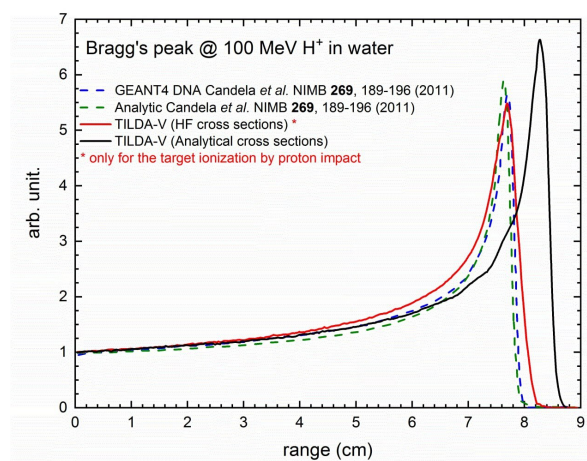


Fig. 1. Determinación del pico de Bragg utilizando diferentes códigos Monte Carlo.

References

- [1] M. A. Quinto *et al.* *Eur. Phys. J. D*, 71:130 (2017) 1-14
- [2] C. Champion *et al.* *Phys. Med. Biol.*, **60** (2015) 7805-7828

¹E-mail: monti@ifir-conicet.gov.ar

Medida da temperatura do H_3^+ produzido na reação $\text{H}_2^+ + \text{H}_2$

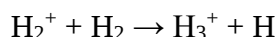
M. Astigarreta¹*, L. Sigaud¹, E. C. Montenegro²

¹Universidade Federal Fluminense, Niterói, Brasil

² Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil

Além de sua longa cadeia de reações que leva à formação de ingredientes fundamentais para a existência da vida, a presença da molécula H_3^+ em meios interestelares e atmosferas de planetas gigantes gasosos é indicativa de fenômenos astroquímicos e físicos que ocorrem nesses ambientes [1]. Assim, não apenas o estudo de sua interação com o meio ao seu redor é importante para a compreensão de tais eventos, mas também o conhecimento dos mecanismos pelos quais ela é formada.

Algumas questões permanecem em aberto acerca do H_3^+ quanto às propriedades das reações nas quais ele está envolvido. Uma delas é a energia cinética liberada na sua formação, através da reação



Propomos aqui uma metodologia onde é possível obter a distribuição de energia cinética do H_3^+ , o que, até o presente momento, não foi medido diretamente. Essa metodologia é baseada na técnica de espectrometria de massa por tempo de voo com extração retardada (DETOF). Foi utilizado um feixe pulsado de elétrons de 100 eV para bombardear o gás hidrogênio somado a um campo eletrostático também pulsado responsável pela extração dos íons.

A técnica DETOF consiste na variação controlada do tempo de atraso entre a ionização do H_2 e a extração dos íons. Durante este intervalo, pode ocorrer a reação química de formação do H_3^+ . A técnica DETOF seleciona os íons produzidos na interação de acordo com suas energias cinéticas: fragmentos mais energéticos

deixam a região de coleta para tempos de atraso menores, enquanto íons lentos permanecem até tempos de atraso mais longos. Logo, a partir da obtenção de diversos espectros de tempo de voo (Fig. 1), para tempos de atraso gradualmente maiores, podemos extrair a distribuição de energia dos íons, que se comporta como uma distribuição de Maxwell-Boltzmann [2], cujo único parâmetro livre é a temperatura. Sendo assim, é possível atribuir às moléculas uma temperatura com a qual elas são produzidas, o que, naturalmente, nos leva à energia com a qual elas foram formadas.

Resultados preliminares mostram que é possível encontrar um bom acordo, através da metodologia desenvolvida, de uma distribuição de Maxwell-Boltzmann supratérmica, com os dados coletados. É a primeira vez que a técnica DETOF é utilizada para análise de reações secundárias e a determinação direta da distribuição de energia dos íons se mostra promissora.

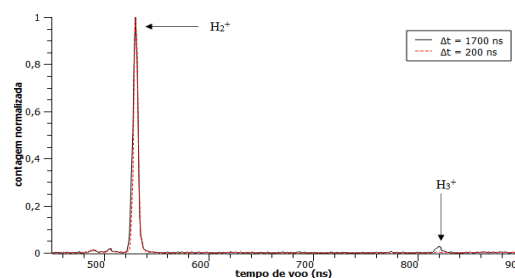


Fig. 1. Espectro de tempo de voo para diferentes tempos de atraso.

Referencias

- [1] Oka, T., *Proc. Natl. Acad. Sci.*: **103** 33 (2006)
- [2] Gerlich, D., *J. Chem. Phys.*: **90** 1 (1989)

* E-mail: moastigarreta@id.uff.br

Estudio de la dinámica de procesos fisicoquímicos sobre superficies a partir de cálculos de primeros principios y aprendizaje automatizado

H. F. Busnengo ¹

Instituto de Física Rosario (Conicet-UNR), Rosario, Argentina

Las simulaciones computacionales atomísticas como la dinámica molecular constituyen una herramienta fundamental para predecir el comportamiento y/o comprender el resultado de observaciones sobre sistemas complejos. Los sistemas átomo- y molécula-superficie y la amplia variedad de procesos fisicoquímicos que tienen lugar en tales sistemas, son ejemplos de tales sistemas complejos. La complejidad deriva de la necesidad de una descripción precisa de las interacciones entre un relativamente grande número de átomos para ser capaces de obtener resultados realistas, lo cual excluye la utilización de potenciales de interacción empíricos simples. Así, desde mediados de los '90, el estado-del-arte de este tipo de simulaciones ha consistido en acoplar la integración de las ecuaciones de movimiento de los átomos del sistema con cálculos de estructura electrónica basados en primeros principios usualmente denominados *ab initio*[1]. Para el caso particular de sistemas que involucran superficies, este tipo de cálculos *ab initio* se basan en la Teoría de la Funcional Densidad (DFT). Sin embargo, el costo computacional de simulaciones directamente acopladas a cálculos DFT resulta demasiado alto y a pesar del creciente aumento en la capacidad de las computadoras, el uso de este tipo de estrategia está limitado a la descripción de procesos muy rápidos o de alta probabilidad. Lamentablemente, muchísimos procesos fisicoquímicos sobre superficies quedan entonces excluidos. Ejemplos de tales procesos son los dominados por eventos poco frecuentes como es la difusión de adsorbatos, y aquellos cuya probabilidad de ocurrencia es baja como en el caso de reacciones químicas con una barrera

de activación significativa.

Entonces, la estrategia predominante en la actualidad para tratar este tipo de casos consiste en generar potenciales atomísticos basados en resultados de cálculos DFT a través de algoritmos de aprendizaje automatizado (ML, sigla en inglés de *Machine Learning*), los cuales son utilizados en las simulaciones y de esta manera se consigue disminuir el tiempo de cálculo de las mismas en al menos 2 órdenes de magnitud. En esta presentación se comentarán brevemente algunos de los métodos de ML utilizados para la generación de potenciales atomísticos a partir de resultados DFT y se ilustrarán los resultados de simulaciones de varios procesos estudiados recientemente con esta metodología en el Grupo de Fisicoquímica en Interfaces y Nanoestructuras (FiQuIN) del Instituto de Física Rosario (IFIR). Se expondrán resultados de los procesos de: i) difusión de un átomo de H sobre Pt(211), ii) dispersión de moléculas de O₂ por superficies de grafito pirolítico altamente orientado (HOPG) [2], iii) adsorción molecular de CO sobre Cu(110), y iv) adsorción disociativa de CH₄ sobre Pt(110)-(1×2) (con una reconstrucción *missing row*).

References

- [1] J. Behler. *Chem. Rev.* **121**, 10037 (2021).
O. T. Unke, S. Chmiela, H. E. Sauceda, M. Gastegger, I. Poltavsky, K. T. Schütt, A. Tkatchenko y K.-R. Müller. *Chem. Rev.* **121**, 10142 (2021).
- [2] A. Rivero-Santamaría, M. Ramos, M. Alducin, H. F. Busnengo, R. D-Muñoz y J. I. Juaristi. *J. Phys. Chem. A* **125**, 2588 (2021).

¹E-mail: busnengo@ifir-conicet.gov.ar

Efectos dinámicos y contribuciones de van der Waals en la difracción de átomos rápidos en incidencia rasante

G. A. Bocan^{1*}, M. S. Gravielle², E.A. Sánchez^{1,3}, H. Khemliche⁴

¹*Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (CNEA-CONICET), Centro Atómico Bariloche, Argentina*

²*Instituto de Astronomía y Física del Espacio (UBA-CONICET), Buenos Aires, Argentina*

³*Instituto Balseiro (U. N. Cuyo), Centro Atómico Bariloche, Argentina*

⁴*Université Paris-Saclay, CNRS, Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay, 91405 Orsay, France*

En esta charla trataremos la difracción de átomos de He en incidencia muy rasante (GIFAD) sobre superficies haluro-alcálicas, en particular KCl(001), siguiendo la dirección axial $\langle 100 \rangle$. Nuestro modelo teórico combina una descripción semicuántica de la dinámica de dispersión (SIVR) con potenciales de interacción proyectil-superficie de alta precisión (PES). A partir de un seguimiento detallado de las trayectorias de deflexión máxima (patrón intra-channel puro), y de la fase cuántica de las trayectorias dispersadas en el plano de incidencia (in-plane), logramos explicar el significativo crecimiento de la corrugación y el ángulo de rainbow, obtenido en experimentos para energías $E_{\perp} = E_{\text{tot}} \sin^2(\theta_i) < 60$ meV (θ_i respecto de la superficie). El mismo resulta de efectos dinámicos sobre los haces incidente y dispersado originados por el pozo de fisisorción (de profundidad < 10 meV). El análisis realizado fue posibilitado por el excelente acuerdo teoría-experimento obtenido [Fig. 1], donde destacamos que las simulaciones y el procesado experimental fueron realizados de manera independiente, sin mediar cruce de información de ningún tipo.

El sistema de trabajo y las condiciones de dispersión consideradas nos brindan un contexto favorable para el estudio de posibles contribuciones de las interacciones de van der Waals (vdW) en el fenómeno GIFAD. Este contexto se da por la combinación de: i) el canal de incidencia $\langle 100 \rangle$, sin contribuciones de polarización, que podrían ocultar efectos debidos a vdW, ii) condiciones de incidencia con muy baja $E_{\perp}$ tales que el proceso de dispersión se mantiene a distancias de la superficie donde las interacciones de vdW podrían ser relevantes, iii) una significativa dependencia de la región de fisisorción

(profundidad y posición del pozo a través del canal) con la inclusión o no de interacciones de vdW en el potencial, y iv) los mencionados efectos dinámicos que, para $E_{\perp} < 60$ meV, torna a la corrugación de la superficie y al ángulo de rainbow muy sensibles a las características de la región de fisisorción. Efectivamente, mostraremos como el acuerdo teoría-experimento para ambas magnitudes analizadas mejora sensiblemente al trabajar con un potencial que incluya interacciones de vdW [1]. Para mayor información, ver nuestro estudio para He-KCl(001) en el canal $\langle 110 \rangle$ [2].

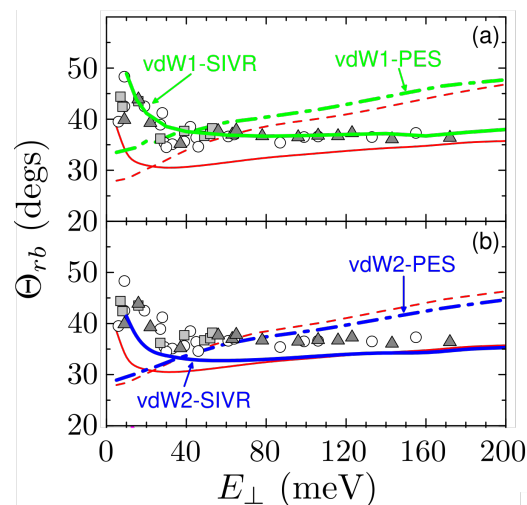


Fig. 1. Ángulo de rainbow vs. $E_{\perp}$. Símbolos: Experimentos. Rojo: resultados con Potencial PBE (sin vdW). Verde y Azul: resultados con dos modelos de contribuciones vdW. Línea guionada(continua): valores intrínsecos (SIVR).

Referencias

- [1] G.A. Bocan *et al*, *Phys. Rev. B* **104**, 235401 (2021).
- [2] G.A. Bocan *et al*, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 096101 (2020).

* E-mail: gisela.bocan@cab.cnea.gov.ar

Elastic and inelastic electron scattering experiments on shape evolution of Au and CdSe thin films

F. S. M. de Oliveira^{1,2}, M. J. Nogueira², Z. E. Fabrim², B. Konrad^{1,2}, A. R. Muniz³ and **P. F. P. Fichtner**^{1,2,4 *}

¹Graduate Program in Mat. Science, Federal University of Rio Grande do Sul (UFRGS), Porto Alegre, Brazil

²Institute of Physics, UFRGS, Porto Alegre, Brazil

³Department of Chemical Engineering, UFRGS, Porto Alegre, Brazil

⁴Department of Metallurgy, Engineering School, UFRGS, Porto Alegre, Brazil

The properties of surface-located atoms affect a myriad of size-dependent physical and chemical properties of nanoscopic objects. In this contribution, we explore elastic and inelastic electron irradiation effects on the displacement of surface-located atoms to investigate the shape modifications of Au (≈ 7 nm thick) and CdSe (≈ 3 nm thick) thin films and access their size-dependent physical properties.

The films are deposited onto a ≈ 15 nm thick silica layer supported by self-standing membranes. The irradiations are performed at room temperature in a 200 keV transmission electron microscope operating at 80 or 200 keV, using electron fluxes from 1.9×10^4 to 1.7×10^6 $e^- \text{ nm}^{-2} \text{ s}^{-1}$.

Figure 1 illustrates the irradiation effect (200 keV) on an Au film [1]. The Au content is conserved. The shape transformation follows the surface energy minimization as a fundamental thermodynamic driving force. Only displacements of surface atoms occur because of the limited elastic energy transfer in binary collisions. Surface atoms similarly govern the shape transformation in CdSe films. However, a highly efficient radiolytic process controls the shape transformation following multiple excitation generation effects from single electron-electron collision events [2].

The shape transformations occur at room temperature. The incident electrons impinge sample regions as events uncorrelated in time and space. They produce an irradiation-driven quasi-steady-state thermodynamic process resulting from individual electron interactions.

Model calculations determine the surface-located atom's migration energy, used to infer other size-dependent physical properties via a scaling approach [1, 3]. Molecular dynamics investigations indicate that capillarity effects based on surface/interface curvatures do not accurately describe the physical phenomena under the present electron irradiation conditions.

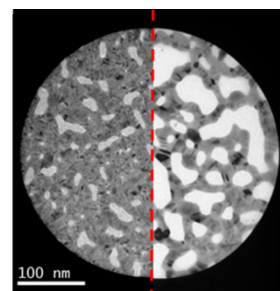


Fig.1. Effect of a 200 keV irradiation onto an Au film from the as-deposited (left) to a fluence of $\approx 3 \times 10^{10} e^- \text{ nm}^{-2}$ (right).

References

- [1] F.S.M. de Oliveira et al.; J. Mater Sci: Mater Electron 32 (2021) 13291-13304.
- [2] Z.Fabrim et al.; work in progress.
- [3] B. Konrad et al.; J. Matter Sci 56 (2021) 8202-8208.

* E-mail: paulo.fichtner@ufrgs.br

Electron choreography at the attosecond time scale

J Vaughan, B Unzicker, S Burrows, B Tatum, D Arthur, T Olsson, S Jain, T Hart, P Stringer, G. M. Laurent¹

Department of Physics, Auburn University, 380 Duncan Drive, Auburn, AL 36849, USA

With the recent development of extreme ultraviolet light sources with attosecond duration, new capabilities emerge for controlling quantum dynamics in matter with an unprecedented level of precision down to the natural timescale of electron motion. So far, attosecond control has been mostly achieved with pump/probe schemes where an attosecond-pump pulse triggers a given electronic process, and a phase-locked femtosecond-probe field is used to steer its dynamics [1]. The system under scrutiny is thus controlled by varying the time delay between the two pulses.

An alternative approach consists of shaping the spectral components of the attosecond pulse to control the dynamics. Within the widely accepted three-step model describing attosecond pulse generation via HHG, the spectral components are defined by the electron wavepacket trajectories (also referred to as quantum orbits) in the driving laser field. By tailoring the temporal waveform of the driving field, the quantum orbits can then be tuned giving some control over the spectral components of the attosecond pulse train (APT). Two-color femtosecond waveforms, for example, have proved to be very efficient in manipulating quantum orbits in the HHG process. The literature is rich with experimental and theoretical studies reporting the dependence of the spectrum of the resulting APT on the temporal profile of such synthesized waveforms [2].

In this work, we show how the APT's spectral phases can be manipulated by varying the intensity ratio r and the relative phase ϕ between the two components of the driving field. As an application for such a spectral pulse shaping technique, we also report on a coherent control experiment where the photoelectron emission from atoms generated by

tailored attosecond pulses in presence of relatively weak IR field is manipulated along the direction of polarization of the light by tuning the spectral phases of the APT [3]. Emission patterns where photoelectrons are emitted in the same direction or, conversely, are emitted in opposite directions depending on their energy can be obtained by tuning the spectral components of the pulse, as shown in Fig. 1.

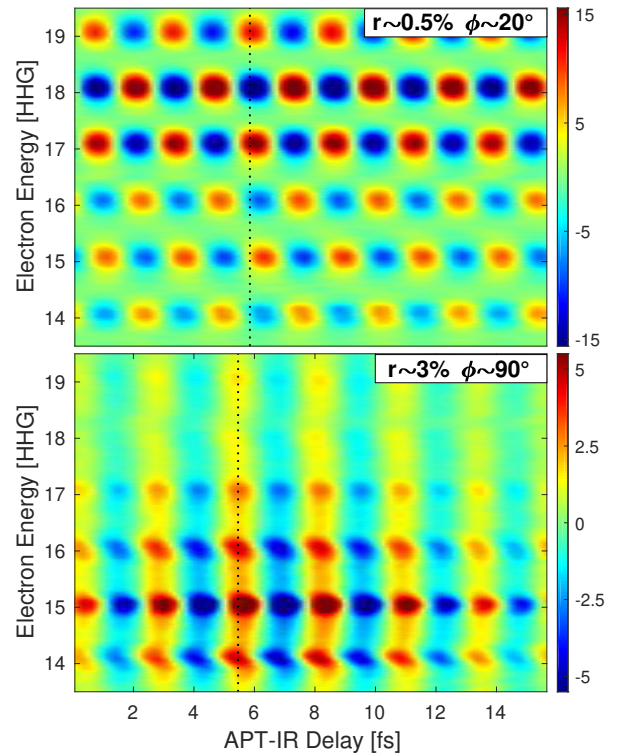


Fig. 1. Density plots of the asymmetric photoelectron emission as a function of the time delay between the APT and IR fields and the photoelectron energy.

References

- [1] Mauritsson J *et al* 2008 *PRL* **100** 073003
- [2] Mauritsson J *et al* 2006 *PRL* **97** 013001
- [3] Unzicker B *et al* 2021 *NJP* **23** 013019

¹E-mail: glaurent@auburn.edu

Procesos multifotónicos ultrarrápidos en átomos

D.I.R. Boll*¹

* *Instituto de Física Rosario, CONICET-UNR, Ocampo y Esmeralda, 2000 Rosario, Argentina*

Los experimentos tipo *pump-and-probe* constituyen los cimientos de lo que actualmente llamamos física del attosegundo ($1 \text{ as} = 1 \times 10^{-18} \text{ s}$) [1], o simplemente attofísica. Por esta razón, el análisis teórico de las reacciones usuales en esa área de la física atómica y molecular requiere el estudio de procesos multifotónicos. El más simple de tales procesos, el de dos fotones, ha permitido tanto caracterizar los primeros trenes de attopulsos que fueron generados [2] como estudiar los retrasos relativos en los procesos de fotoionización de blancos atómicos [3] y moleculares [4]. En todos estos casos, se empleó una técnica interferométrica denominada RABBITT (*Reconstruction of Attosecond Bursts by two-photon Transitions*), en la cual la ionización del blanco es producida por un tren de pulsos de attosegundos, en presencia de un láser infrarrojo de baja intensidad. De esta forma, los patrones de interferencia observados en los espectros de fotoelectrones son el resultado de la combinación coherente de todos los caminos cuánticos que conducen al mismo estado final mediante transiciones de dos fotones. En esta charla, presentaremos resultados numéricos y analíticos para este tipo de reacciones, con énfasis en las distribuciones angulares de fotoelectrones [5], su relación con los tiempos de retraso relativo [6] y las recientes reglas de propensión de Fano generalizadas [7]. Asimismo, analizaremos los resultados obtenidos cuando se consideran distintas configuraciones geométricas de los láseres empleados [8, 9]. En cada uno de los casos comentaremos además sobre el costo computa-

cional de cada uno de los enfoques posibles.

Por otra parte, los esfuerzos actuales para desarrollar pulsos de attosegundos de mayor intensidad están atrayendo un interés creciente sobre otro tipo de reacciones de dos fotones, las de un único color. En este caso, también presentaremos resultados numéricamente exactos para blancos de helio, así como un modelo simple para analizar dichos procesos [10]. Mostraremos que la comparación entre ambos enfoques permite comprender el rol que juega la correlación electrónica en tales reacciones.

References

- [1] F. Krausz *et al.* *Rev. Mod. Phys.* 81, 163 (2009)
- [2] P.M. Paul *et al.* *Science* 292, 1689 (2001)
- [3] K. Klünder *et al.* *Phys. Rev. Lett.* 106, 143002 (2011)
- [4] M. Huppert *et al.* *Phys. Rev. Lett.* 117, 093001 (2016)
- [5] D. Boll *et al.* *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 49, 185601 (2016)
- [6] D. Boll *et al.* *Phys. Rev. A* (submitted)
- [7] D. Busto *et al.* *Phys. Rev. Lett.* 123, 133201 (2019)
- [8] D. Boll *et al.* *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 50, 235604 (2017)
- [9] D. Boll *et al.* *Phys. Rev. A* 101, 013428 (2020)
- [10] D. Boll *et al.* *Phys. Rev. A* 99, 023416 (2019)

¹E-mail: boll@ifir-conicet.gov.ar

Caracterização eletrônica e estrutural de nanopartículas de Au

L. P. Etcheverry^{1*}, Maria C. M. Alves², J. Morais¹

¹*Instituto de Física - UFRGS, Porto Alegre, Brasil*

²*Instituto de Química – UFRGS, Porto Alegre, Brasil*

A nanotecnologia tem atraído a atenção de pesquisadores devido principalmente as suas diversas aplicações. As nanopartículas (NPs) metálicas como, por exemplo, as de prata (Ag), ouro (Au), platina (Pt) e paládio (Pd), têm sido amplamente estudadas nos últimos anos devido às suas propriedades únicas. Estas propriedades englobam especialmente o seu tamanho e sua grande área superficial efetiva [1]. Em particular, nanopartículas de ouro podem ser empregadas em muitos campos: biosensores, catálise, eletrônica, eletrodos de enzimas, supercondutores, e terapia do câncer entre outros. NPs podem ser obtidas através de métodos físicos, químicos ou biológicos de síntese [2]. Do ponto de vista de caracterização, é necessário associar muitas técnicas experimentais para determinação de suas propriedades físico-químicas.

No presente trabalho, foi realizada a síntese química de NPs de ouro em uma solução coloidal. Em seguida foi realizada a deposição por *spin-coating* das NPs sobre substratos de óxido de silício crescido termicamente sobre (Si).

Quando se estuda materiais com grande área superficial, uma técnica que é essencial para a caracterização dos mesmos é a Espectroscopia de Fotoelétrons induzidos por Raio-X (XPS). O XPS é uma das técnicas mais utilizadas nas últimas décadas para análise química de superfícies [3]. Através

dela é possível determinar o ambiente químico em que essas NPs se encontram.

Neste trabalho, foram determinados os estados de oxidação das NPs de Au e os outros elementos na superfície das amostras.

Com o objetivo de caracterizar estruturalmente as NPs, foram utilizadas duas técnicas de análise por feixes de íons: Retroespalhamento de Rutherford (RBS) e Espalhamento de Íons de Média Energia (MEIS). Através da técnica de RBS é possível estimar a quantidade em átomos/cm² de Au presente nas amostras. O MEIS é uma técnica de feixe de íons com alta sensibilidade de superfície e alta resolução de profundidade, sendo assim adequada para elucidar nanoestruturas [4]. Sendo possível determinar a porcentagem do recobrimento das NPs na superfície da amostra, e como elas estão dispostas.

Utilizando estas três técnicas de caracterização buscou-se estabelecer uma correlação entre as propriedades estruturais e eletrônicas das nanopartículas de Au.

Referencias

- [1] Ribeiro, A. I. *et al*, *ACS Appl. Nano Mater.*, **5** 3030–3064 (2022).
- [2] Ghosh, S. *et al*, *Chemosphere*, **288** 132585 (2022).
- [3] Nilsson, A., *Faraday Discuss* (2022).
- [4] Paes, V. Z. C., *J. Phys. Chem. C*, **121** 19461–19466 (2017).

* E-mail: louise.etcheverry33@gmail.com

Separación isotópica de litio por láser para aplicaciones nucleares

P. Knoblauch*, A. Bruchhausen†, P. Fainstein^{*1}, A. Fainstein†, D. Fregenal*, M. Guyón†, G. Rozas†, D. Biasseti*, E. Cortizo*, S. Encina*, P. Frigerio*, E. Kaul*, A. Lamagna*, F. Niro*, J. Ramos*, P. Schönhals*, M. Zarco*, J. Fiol*

* *Subgerencia Aplicaciones de la Tecnología Láser - Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica, Argentina*

† *División Óptica y Fotónica, Gerencia Física (GAIyANN, CNEA), Centro Atómico Bariloche, 8400 Bariloche, Argentina*

En los últimos años, la extracción y procesamiento de litio recibió un fuerte impulso enfocado, principalmente, en la fabricación de baterías para automóviles. Sin embargo, este elemento también posee una gran importancia en la tecnología nuclear. El isótopo litio-7 se utiliza en el circuito primario de centrales nucleares de agua presurizada y el litio-6 se emplea como blindaje o como detector de neutrones. El uso del litio isotópicamente puro en estas actividades requiere de cantidades muy inferiores a las necesarias para la producción de baterías, grasas, etc., pero su producción tiene un enorme valor agregado.

En este trabajo se presentan resultados de separación isotópica de litio basada en el método de Atomic Vapor Laser Isotope Separation (AVLIS) [1]. La técnica se basa en la ionización selectiva por láser de los isótopos de interés. En un horno especialmente diseñado se genera un haz atómico vaporizando litio metálico a temperaturas superiores a los 400 °C. Un sistema de orificios o rendijas colima el haz atómico que es dirigido a una cámara de procesos acoplada a un espectrómetro de masas por tiempo de vuelo (TOF). El haz de litio se irradia con

un láser, sintonizado alrededor de 671 nm, que produce la excitación selectiva de uno de los isótopos. Un segundo láser es utilizado para la ionización del átomo excitado. Los iones generados se extraen mediante un campo eléctrico para su recolección o para su análisis por TOF. El haz neutro se colecta por separado.

Se exhibirá el diseño de las partes que componen el dispositivo: horno de vaporización, cámara de procesos, láseres y espectrómetro. También se presentarán espectros de tiempo de vuelo asociados con el haz atómico natural y el efecto de la excitación sobre las componentes isotópicas del mismo. Se presentarán resultados de selectividad y se discutirá la aplicación de esta técnica para la producción de litio enriquecido isotópicamente para su uso en la industria nuclear.

References

- [1] H. J. Strydom, Mass spectrometry characterization of laser produced products, PhD Thesis, Department of Physics, University of Natal (Sudáfrica, 1999).

¹E-mail: pablof@cab.cnea.gov.ar

Seleção isotópica na produção de dicátions metaestáveis de benzeno

L. Sigaud¹*, W. Wolff², E. C. Montenegro²

¹Universidade Federal Fluminense, Niterói, Brasil

² Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil

A dupla ionização do benzeno inicia uma competição entre a sua fragmentação, promovida pela repulsão Coulombiana, e a sua estabilização na forma de um dicátion molecular. No entanto, do estado fundamental para o estado metaestável com dois elétrons a menos a molécula sofre um forte rearranjo geométrico de seus componentes, com um dos núcleos de carbono deixando o plano geométrico original.

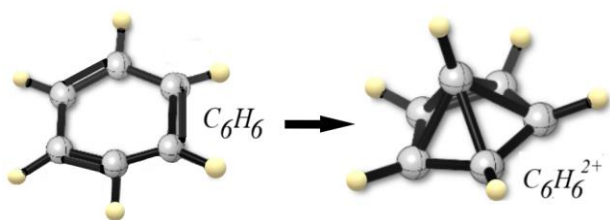


Fig. 1. Representação da mudança na geometria da molécula de benzeno quanto se torna um dicátion.

A análise espectrométrica do dicátion molecular de benzeno esbarra na dificuldade de se conseguir separá-lo do fragmento molecular $C_3H_3^+$, o qual possui a mesma razão massa/carga (m/q). Tradicionalmente, em moléculas com simetria par (e.g. N_2 e O_2 [1]), esta dificuldade é contornada utilizando-se um análogo isotópico do dicátion molecular de modo a produzir uma razão m/q diferente do fragmento da molécula quebrada ao meio – no caso, $^{13}C^{12}C_5H_6$ [2]. Com a técnica DETOF, medidas da produção de dicátions desta classe de moléculas podem ser realizadas diretamente [3].

Neste trabalho, a dupla ionização da molécula de benzeno foi estudada por impacto de elétrons de 30 a 800 eV de energia. Através da técnica DETOF, as diferentes distribuições de energia cinética presentes para cada pico do espectro foram determinadas. Assim, o dicátion

molecular de benzeno, que retém uma distribuição de energia de Maxwell-Boltzmann, pode ser separado do fragmento $C_3H_3^+$. A produção do dicátion com a substituição isotópica de um ^{13}C no anel aromático também foi medida.

Os resultados experimentais [4] mostraram que a estabilização após a dupla ionização da molécula de benzeno é extremamente sensível a essa substituição isotópica de um único átomo de carbono. Observou-se uma diferença de aproximadamente 40% a mais na produção de dicátions metaestáveis de $^{12}C_6H_6^{2+}$ comparada ao $^{13}C^{12}C_5H_6^{2+}$ [4]. Uma vez que essa discrepância não está presente para moléculas menores, pode-se atribuir esse resultado à mudança de conformação da molécula de benzeno quando esta tem dois elétrons removidos. O rearranjo na posição dos núcleos no período transiente para a nova geometria parece favorecer mais a sua fragmentação quando uma assimetria de massa é introduzida no sistema.

Os resultados obtidos representam portanto uma quebra de paradigma em relação ao uso de análogos isotópicos para se obter seções de choque de produção de dicátions moleculares pares, em especial quando houver uma mudança significativa na geometria da molécula.

Referencias

- [1] Märk T D *J. Chem. Phys. : Conf. Ser.* **63**, 3731 (1975).
- [2] Wolff W *et al.*, *J. Phys. Chem. A* **124** 9261 (2020).
- [3] Sigaud L and Montenegro E C, *J. Phys.: Conf. Ser.* **1412** 052007 (2020).
- [4] Sigaud L *et al.*, *Phys. Rev. A* **105** 032816 (2022).

* E-mail: lsigaud@id.uff.br

Historia del Taller "La Física al Alcance de Todos - Prof. Daniel Córdoba"

Maximiliano Baldiviezo^{† 1}

[†] *Universidad Nacional de Salta, Salta, Argentina*

Recorreremos la historia de vida del Profesor Daniel Córdoba, previa al inicio de su obra principal, el Taller "La Física al Alcance de Todos". Luego veremos cómo es que creó y sostuvo esta actividad en la Enseñanza de la Física, durante 30 años, en la Ciudad de Salta.



HISTORIA PREVIA

Un 25 de Mayo, en San Pedro de Jujuy, Argentina, nace Daniel Rubén Córdoba. De joven, comenzó a apasionarse por el conocimiento en una biblioteca. En ella dibujaba experimentos que encontraba en los libros y esperaba con ansias el momento en que sus padres no estuvieran presentes en su casa para poder hacerlos. Recorriendo ingenios azucareros pudo darse cuenta que no era en sí la industria del conocimiento lo que le apasionaba, sino cómo cualquier rama de él podía servir como excusa para comunicar. Años más tarde, esta idea se consolidaría convirtiéndolo en un jinete que, cabalgando en el caballo de las pasiones, encontraría en la comunicación del conocimiento una forma de vivir la posguerra. Daniel fue combatiente en la llamada guerra de las Malvinas o conflicto

del Atlántico Sur.

LA FÍSICA AL ALCANCE DE TODOS

Luego de la guerra, Daniel encontró en la Enseñanza de la Física, plagada de humanismo, humor, epistemología e historia, una forma de sobrevivir y de transmutar lo vivido. Convirtió aquellos sueños truncados por la guerra, en una fuente de sueños y despertar de vocaciones, contribuyendo al crecimiento de cientos de jóvenes.

Sin haber culminado su formación, inició su camino como docente en el Instituto de Educación Media dependiente de la Universidad Nacional de Salta, en la cuál se encontraba cursando sus estudios de grado en física. Las estructuras rígidas de los estándares de enseñanza no tardaron en impulsar a Daniel a desarrollar su vocación docente en la clandestinidad, desde donde iniciaría un contexto de enseñanza propio y original. Este contexto se denomina actualmente Taller "La Física al Alcance de Todos". En él, Daniel impulsó pasiones y vocaciones, compartió aspectos profundos del aprendizaje y se abrió camino en un contexto de gran hostilidad. Cientos de estudiantes se juntaban los sábados por la mañana a estudiar física, algunos participaron en la Olimpiada Argentina de Física obteniendo gratos resultados y una gran mayoría incorporó la física a su cultura general para luego convertirse en profesionales de la ciencia.

Luego de 30 años de esfuerzo sostenido, Daniel contrae una enfermedad que culminó con su fallecimiento el 27 de Diciembre del año 2019.

¹E-mail: maximiliano.baldiviezo@gmail.com

Principio (y fin) de la Tabla Periodica

J. E. Miraglia*¹,

* Instituto de Astronomía y Física del Espacio (Conicet-UBA), Buenos Aires, Argentina

La historia de Tabla Periódica acompañó al descubrimiento de los elementos de la naturaleza [1,2]. Fue una historia fascinante que comenzó con la alquimia y que posteriormente, en el siglo XVII, la abandona para seguir la rigurosidad de las ciencias naturales. Fue primeramente propuesta por Dimitry Mendeleev en 1869 y tomó su forma actual a comienzo del siglo XX con Henry Moseley (Fig. 1).

Mendeleev propone la Tabla Periodica en una corto período de grandes cambios conceptuales: en 1859 Darwin publica el origen de las especies y en 1965 Maxwell descubre que la luz es un fenómeno electromagnético.

Hoy la Tabla Periódica llegó hasta el elemento 118, llamado Oganesson, que tiene una vida de apenas un milisegundo. Hay duda sobre la existencia de otros elementos más pesados que tengan una subsistencia mas o menos duradera [3], con lo cual estaríamos en presencia del fin de la Tabla Periódica.

La charla va a cubrir brevemente los acontecimientos mas importante de su historia, desde la alquimia hasta los grandes aceleradores de partículas que se han transformado hoy en la nuevas "fábricas" de los elementos transuránicos. Nos detendremos en las contribuciones de las figuras mas notables como: Boyle, Lavoisier, Dalton, Berzelius, Mendeleev, Moseley como así también los contextos históricos y geográficos (Fig. 2). También destacaremos el rol de otros científicos como Meyer y Newlands que contribuyeron al descubrimiento de la Tabla Periódica pero que su participación fue opacada.

Expondremos sobre las propiedades físicas que tendrían los elementos trans-oganesianos de ser posible su producción. Finalmente discutiremos sobre el futuro de la Tabla

Periódica y sobre las islas de estabilidad.

LA TABLA PERIODICA HOY

Fig. 1. Tabla Periódica actual.

LA GEOGRAFIA

Element & Country of Discovery

UK, Germany, Sweden, France, & USA, Russia

Fig. 2. Países en que fueron descubiertos los elementos.

References

- [1] Mary E Weeks, *Discovery of the Elements*, *Journal of Chemical Education*, 6th edition, (1960). Library of Congress Catalog Card No.: 56-6382.
- [2] Paul Strathern, *Mendeleev's Dream*, Pegasus Books, New York London, (2001). ISBN: 978-1-64313-069-9
- [3] G. Audi et al. The NUBASE2016 evaluation of nuclear properties, *Chinese Physics C* Vol. 41, (2017) 030001

¹E-mail: miraglia@iafe.uba.ar

Modelo variacional para estructura electrónica y factores de forma de iones y átomos desde He hasta Ne

N. R. Arista*

División Colisiones Atómicas, Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro, S. C. de Bariloche, Argentina

Se realiza un estudio usando el método variacional para describir en forma aproximada la estructura electrónica y calcular los factores de forma de iones y átomos con número atómico entre 2 y 10, incluyendo todos los posibles estados de carga. Los resultados se comparan con los obtenidos usando el método de Hartree-Fock.

Un problema importante para describir la interacción de iones con la materia es la dificultad de disponer de modelos para representar la estructura interna de iones de diverso tipo. Esta dificultad se suele soslayar mediante la utilización de métodos estadísticos para describir la estructura electrónica del ion [1]. La ventaja de este método es la gran generalidad y facilidad de aplicación, pero su limitación es no poder describir los aspectos particulares relacionados con la estructura de capas atómicas.

El presente trabajo consiste en un estudio teórico basado en el método variacional [2] para describir la estructura electrónica de los sistemas atómicos indicados previamente. Para tal fin es necesario calcular los términos de interacción electrónica, incluyendo términos directos y de intercambio entre todos los estados de los niveles 1s, 2s y 2p. El número total de términos de interacción llega a 65 en el caso del Neon, aunque muchos de esos términos resultan iguales. En este trabajo se obtienen resultados algebraicos exactos para todos esos términos. Los cálculos se realizan usando alternativamente un único parámetro variacional, o dos parámetros variacionales. Los valores de esos parámetros se determinan minimizando el valor de expectación de la energía total.

Esto permite obtener expresiones analíticas para las densidades electrónicas de los diversos iones y para los factores de forma correspondientes. La forma final de estos factores es una suma de no más de tres términos, dependiendo de la población de los estados 1s, 2s y 2p. En este caso se utilizan funciones de onda parametrizadas de tipo hidrogenoide, por lo cual las expresiones para los factores de forma son funciones analíticas sumamente “sencillas” [3].

Los resultados de estos cálculos se comparan con los obtenidos a partir de funciones de onda que resultan de resolver las ecuaciones de Hartree-Fock. En particular se utilizan en este trabajo los resultados de Clemente y Roetti [4], obteniéndose en todos los casos comparaciones satisfactorias.

La posibilidad de contar con fórmulas simples y con sólo uno o dos parámetros variacionales permite abordar diversos problemas relacionados con la interacción de iones con sólidos y plasmas. Si bien el tratamiento es aproximado, tiene la ventaja de poder describir una gran cantidad de casos (un total de 55 tipos de iones y átomos considerando todos los estados de carga posibles entre el H y el Ne, y aparte de los 10 núcleos puntuales).

Referencias

- [1] W. Brandt and M. Kitagawa, *Physical Review B*, **25**, 5631 (1982).
- [2] H. A. Bethe and R. Jackiw, *Intermediate Quantum Mechanics*.
- [3] P. L. Grande (private communication).
- [4] Clemente and Roetti, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, **14**, 177 (1974).

* E-mail: arista@cab.cnea.gov.ar

Modelo unificado de paquete de onda para interacciones de partículas en blancos fríos y plasmas

C. D. Archubi¹, N. R. Arista²*

¹IAFE, Ciudad de Buenos Aires, Argentina

²CNEA, San Carlos de Bariloche, Argentina

Proponemos un modelo dieléctrico unificado -UWPM- para evaluar procesos de interacción electrónica de partículas cargadas con la materia condensada fría y caliente, incluyendo pérdida de energía, camino libre medio, straggling y rangos de termalización de iones desnudos y partículas livianas tales como positrones y electrones. Formulamos nuestro método introduciendo modificaciones al método del modelo de paquete de onda extendido para haces de protones. Este modelo fue propuesto en su forma inicial -WPM- para stopping de protones incidentes en blancos fríos en una serie de papers por T. Kaneko [1], y fue modificado recientemente por nosotros en otra serie de papers introduciendo primero el efecto del gap de energía -EWPM- [2] y posteriormente los efectos de la temperatura en el stopping -UWPM-[3] y más recientemente, modificaciones cuánticas específicas para el resto de los momentos y para incluir los casos de positrones y electrones en blancos calientes [4]. El punto de partida es la aproximación por paquetes de onda gaussianos de los estados electrónicos del blanco, teniendo en cuenta el gap de energía y el estado de ionización en el caso de orbitales ligados, y el aumento de la densidad electrónica en el caso del gas caliente de electrones libres como consecuencia de la ionización. Se deduce una función dieléctrica específica, en cada uno de estos dos casos, para dichos paquetes. Nuestro modelo es aplicable en un extenso rango de energías con densidades y temperaturas que van desde

condiciones normales de laboratorio hasta muy altos valores, tales como aquellos de interés para la fusión nuclear y en estudios de astrofísica.

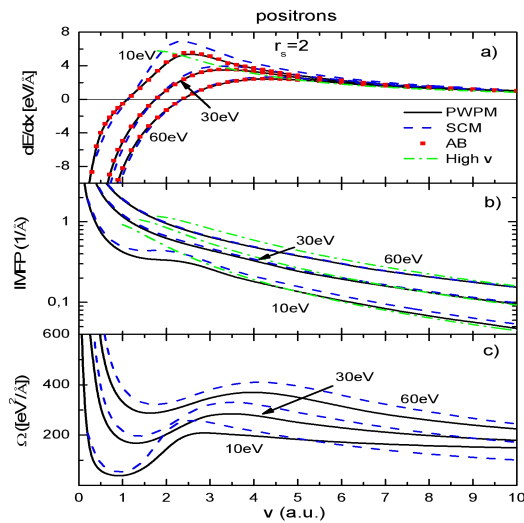


Fig. 1. Momentos de la pérdida de energía de positrones que atraviesan un plasma con densidades correspondientes al estado sólido, para diferentes temperaturas expresadas en eV, en función de las velocidades del proyectil. PWPM: nuestro modelo unificado de paquete de onda. AB: modelo de Arista-Brandt [9]. SCM: modelo semiclásico

Referencias

- [1] T. Kaneko, At. Data Nucl. Data Tables 53, 271 (1993).
- [2] C. D. Archubi and N. R. Arista, Phys. Rev. A 96, 062701 (2017).
- [3] C. D. Archubi and N. R. Arista, Phys. Rev. A 102, 052811 (2020).
- [4] C. D. Archubi and N. R. Arista, Phys. Rev. A 105, 032806 (2022).

* E-mail: archubi@iafe.uba.ar

Medindo poder de frenagem de $^{12}\text{C}^+$ e $^{16}\text{O}^+$ em filmes finos de carbono utilizando o SSAMS-UFF

R. Linares¹, L.M. Fonseca¹, H.C. Santos², N. Added², C. C. Seabra^{1,1}, Y.T. Xing¹

¹*Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense, 24210-340, Niterói, Rio de Janeiro, Brazil*

²*Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo, Brazil*

O Laboratório de Radiocarbono da Universidade Federal Fluminense possui um acelerador de partículas eletrostático 250KV-SSAMS, de 250 kV e estágio único de aceleração fabricado pela National Electrostatic Corp, dedicado para medidas da razão isotópica do radiocarbono. O acelerador possui dois eletroímãs, para seleção da massa de interesse, um stripper gasoso, e um analisador esférico eletroestático (ESA, sigla em inglês). O ESA está posicionado após o segundo eletroímã. A detecção do radiocarbono é realizada por um detector de Si situado após o ESA, enquanto os isótopos estáveis são monitorados por copos de Faraday posicionados após o segundo eletroímã e fora da direção do feixe de ^{14}C . A performance geral do acelerador, em termos de estabilidade elétrica e intensidades típicas dos feixes extraídos, torna-o adequado para estudos experimentais de colisões atômicas à baixas energias. Neste regime de energia, a dead layer (camada morta) dos detectores de Si limita significativamente seu uso para determinar com precisão a energia dos íons incidentes.

Neste trabalho apresento a metodologia adotada para utilizar o acelerador 250KV-

SSAMS para medidas do poder de frenagem de folhas de carbono para íons de $^{12}\text{C}^+$ e $^{16}\text{O}^+$ com energias entre 10 e 25 keV/u [1]. A escolha do alvo é estratégica pois um amplo conjunto de dados experimentais para o poder de frenagem de carbono está disponível numa ampla faixa de energia e para diversos íons incidentes. A montagem experimental adotada explora o uso do ESA como elemento detector, com o qual o alvo de carbono autopoortante é montado num dispositivo móvel posicionado à frente. O poder de frenagem é determinado a partir da perda de energia dos íons ao atravessar o alvo de carbono. A espessura do alvo é mensurada utilizando um feixe de prótons com energias entre 200 keV e 250keV. Irei discutir as principais fontes de incertezas nessa técnica e apresentar os dados experimentais para o poder de frenagem com precisão de aproximadamente 0.5%.

References

- [1] R. Linares *et al.* *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 945 (2019) 162610

¹E-mail: carolineseabra@id.uff.br

Determinação das secções eficazes nucleares de ^1H e ^3He em ^9Be na gama de energias de 0.5–2.35 MeV

N. Catarino^a, C.M. Vitor^a, R. Mateus^a, J. Cruz^b, N.P. Barradas^c, E. Alves^a

^aIPFN, Instituto Superior Técnico, U. de Lisboa, 1049-001 Lisboa, Portugal

^bLIBPhys, Faculdade de Ciências e Tecnologia, U. Nova de Lisboa, Monte da Caparica, 2892 - 516 Caparica, Portugal

^cC2TN, Instituto Superior Técnico, U. de Lisboa, E.N.10 Bobadela LRS, 2695-066, Portugal

O berílio é um dos elementos que será utilizado em grande escala na construção dos futuros reatores de fusão nuclear. O interior da câmara onde o plasma é confinado no reator termonuclear experimental (ITER) tem as paredes cobertas por telhas de Be ou W. O estudo dos processos de interação do plasma com estas telhas, nomeadamente a erosão, deposição, implantação e retenção dos componentes do plasma (^2H ^3H) é fundamental para projectar as condições de funcionamento dos futuros reatores em segurança.

As técnicas de feixe de iões (Ion Beam Analysis, IBA) são ideais para estudar os processos de interação do plasma com os materiais das paredes dos reatores pois permitem medir os perfis de concentração dos vários elementos de uma forma quantitativa. O Laboratório de Aceleradores do Instituto Superior Técnico da Universidade de Lisboa participa no programa europeu de fusão nuclear analisando várias telhas recolhidas de tokamacks, nomeadamente do JET para modelar os processos de interação utilizando as técnicas de IBA [1]. Nomeadamente a retrodispersão elástica (EBS) e de Rutherford (RBS), análise com reacções nucleares (NRA) e emissão de raios X induzida por partículas (PIXE). Porém é necessário conhecer com a máxima precisão os valores das secções eficazes utilizadas nos cálculos de modo a obter valores fiáveis.

Os valores das secções eficazes do Be que se encontram na literatura apresentam algumas incertezas e em algumas gamas de energia são mesmo desconhecidas. Como o Be é fundamental para a nossa investigação foi iniciado um projecto com o apoio da IAEA para medir algumas das secções eficazes mais importantes para a utilização das técnicas de feixe de iões.

Neste trabalho foram utilizados feixes de ^1H e ^3He e as secções eficazes diferenciais medidas na gama de energia de 1.0 a 2.5 MeV. As secções eficazes das reacções de $^9\text{Be}(^3\text{He}, p_x)^{11}\text{B}$ ($i = 0 - 9$), $^9\text{Be}(p, p_0)^9\text{Be}$, $^9\text{Be}(p, d_0)^8\text{Be}$ e $^9\text{Be}(p, \alpha_0)^6\text{Li}$ foram obtidas utilizando um filme fino de Be depositado sobre W para ângulos de retrodispersão entre 110° e 165° com um passo de 5° . Os resultados foram comparados com os valores publicados em trabalhos anteriores, apresentando um bom acordo com os obtidos por Barradas et al. [2] e Provatas et al. [3].

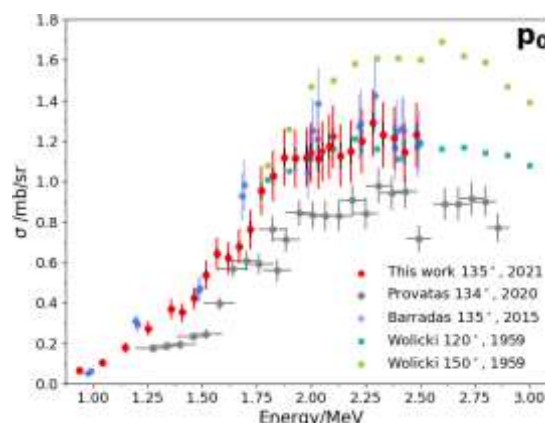


Fig. 1. $^9\text{Be}(^3\text{He}, p_0)^{11}\text{B}$ cross sections for the laboratory angle of 135° .

Referencias

- [1] N. Catarino et al, Nuclear Materials and Energy [12 559 \(2017\)](#)
- [2] Barradas N. P. et al, Nucl Instruments Methods Phys Res Sect B Beam Interact with Mater Atoms [346 21 \(2015\)](#)
- [3] Provatas G et al., Nucl Instruments Methods Phys Res Sect B Beam Interact with Mater Atoms [472 36 \(2020\)](#)

* E-mail: evalves@ctn.tecnico.ulisboa.pt

Aprendizaje automático en Stopping Power: datos y modelos

Felipe Bivort Haiek, Alejandra Mendez¹, Darío Mitnik, Claudia Montanari

Instituto de Astronomía y Física del Espacio (CONICET-UBA), Buenos Aires, Argentina

La pérdida de energía cinética por unidad de longitud de un ion cuando atraviesa la materia se cuantifica mediante el poder de frenado o *stopping power*. Según la naturaleza de su interacción con el blanco, el stopping puede ser nuclear o electrónico. Actualmente, la base de datos de mediciones experimentales de stopping power electrónico más completa pertenece a la Agencia Internacional de Energía Atómica (IAEA) [1]. Este repositorio es abierto y se actualiza continuamente [2], poniendo a disposición de la comunidad científica casi un siglo de mediciones [3]. En el presente trabajo estudiamos estos datos utilizando métodos del campo del aprendizaje automático o *machine learning*.

Los miles y miles de datos en la compilación de la IAEA han sido medidos a lo largo de nueve décadas, por múltiples autores/laboratorios, y utilizando diversas técnicas experimentales. Naturalmente, la data presenta significativas dispersiones en ciertos rangos de energía, como se muestra en la Fig. 1 para H en Al. La limpieza de estos datos es una parte esencial del aprendizaje automático; sin embargo, la depuración manual de estos valores es inviable. Por ello, implementamos un método de aprendizaje automático basado en una técnica de agrupamiento no supervisado (DBSCAN). Este método identifica valores atípicos y determina qué datos conservar en caso de superposición, teniendo en cuenta el año de producción.

El conjunto de datos resultante se utiliza para entrenar una red neuronal profunda. El modelo reproduce con precisión los valores de entrenamiento y de sistemas colisionales desconocidos para la red neuronal (conjunto de prueba). Finalmente, se presentará el código ESPNN (Electronic Stopping Power with Neu-

ral Network) [4], mostrando su utilización y algunos resultados, tales como el que se muestra en la Fig. 1.

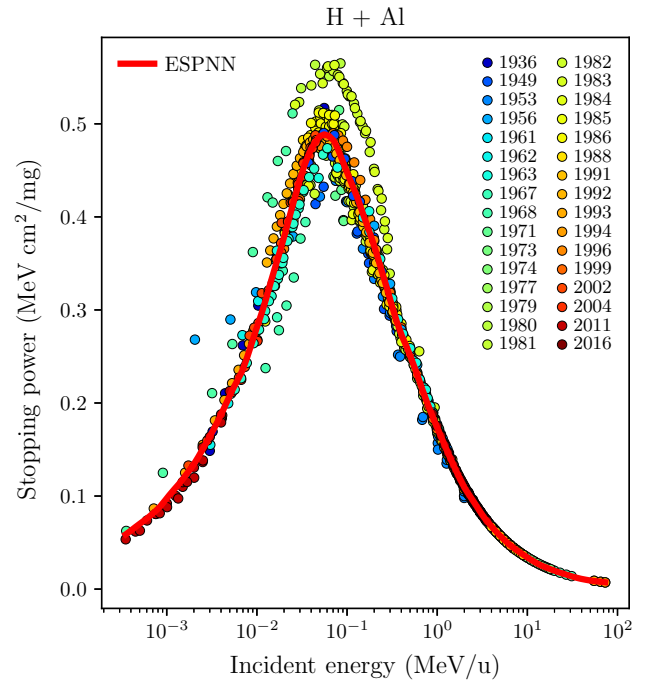


Fig. 1. Stopping power electrónico de H en Al. Curva: resultados del modelo ESPNN. Simbolos: datos experimentales compilados en [1].

References

- [1] Poder de frenado electrónico de la materia para iones, <https://www-nds.iaea.org/stopping/>
- [2] C. C. Montanari, P. Dimitriou, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B 408, 50 (2017).
- [3] H. Paul, AIP Conf. Proc. 1525, 295 (2013).
- [4] A. Mendez, F. Bivort Haiek, D. Mitnik, C. Montanari, <https://github.com/ale-mendez/ESPNN>

¹E-mail: alemendez@iafe.uba.ar

Perda de energia de íons leves em materiais candidatos para futura geração de reatores de fusão nuclear

E. Pitthan^{1*}, M.V. Moro¹, J. Shams-Latifi¹, P. M. Wolf¹, B. Bruckner¹, D. Moldarev¹, P. Ström¹, e D. Primetzhofer^{1,2}

¹ Department of Physics and Astronomy, Uppsala University, Uppsala, Sweden

² The Tandem Laboratory, Uppsala University, Uppsala, Sweden

Erosão e formação de defeitos pela interação do plasma com a matéria tem sido extensivamente estudados por serem processos-chave no entendimento e operação de futuros reatores de fusão nuclear. Nesses processos, a perda de energia das espécies presente no plasma com os componentes voltados para o plasma é uma importante grandeza para códigos computacionais usados para modelar processos de erosão e implantação nesses reatores [1]. Esta grandeza pode ser descrita como *stopping power* eletrônico: a energia do íon depositada pela interação com o meio eletrônico do alvo por unidade de comprimento para um determinado conjunto de íon-alvo. Apesar de sua importância, são poucos os conjuntos de dados experimentais de *stopping power* eletrônico para íons em materiais que podem interagir com o plasma. Além disso, potenciais efeitos pela geração de defeitos por irradiação no *stopping power* eletrônico são desconhecidos.

Nesta contribuição, *stopping power* eletrônico deduzido experimentalmente para espécies presentes no plasma (H, D, e He) em candidatos para futura geração de materiais voltados para o plasma em reatores de fusão nuclear (Fe, W e EUROFER) serão apresentados. Esta informação será extraída no intervalo de energia de sub-keV até MeV baseado na intensidade de espectros obtidos em geometria de retroespalhamento (*backscattering spectrometry*, BS) [2], como exemplificado na Fig.1. A presença e quantificação de impurezas presente na superfície e *bulk* das amostras será extraída *ex* ou *in-situ* por *time-of-flight-energy elastic recoil detection analysis* (ToF-ERDA) e *Auger electron spectrometry* (AES). O *stopping power* eletrônico será obtido em materiais irradiados, não-irradiados, e re-depositados visando compreender possíveis efeitos da formação de defeitos no processo de perda de energia. Os

materiais irradiados e re-depositados serão adicionalmente caracterizados por BS, ToF-ERDA, e *X-ray diffraction analysis* (XRD). Além de aumentar o número de conjuntos de dados experimentais, esperamos aumentar o entendimento de como defeitos causados nesses materiais pela interação com o plasma podem potencialmente afetar quantidades fundamentais no processo de perda de energia.

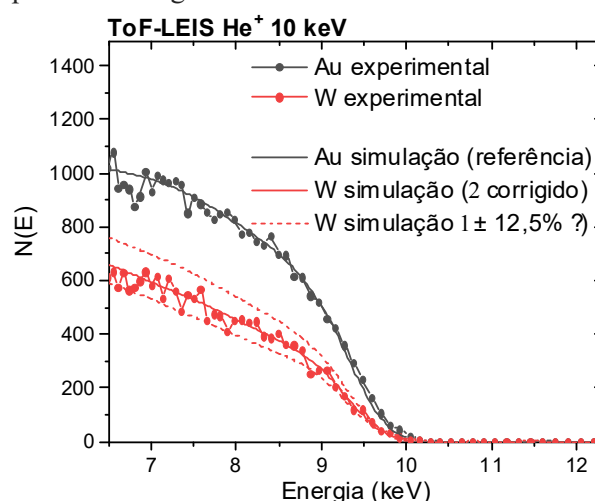


Fig. 1. Espectros experimentais obtidos por *Time-of-Flight Low Energy Ion Scattering* usando feixe primário de He^+ 10 keV e respectivas simulações usadas para extrair o *stopping power* eletrônico em amostras de W usando Au como referência.

Referencias

- [1] S. Brezinsek et al., Nucl. Fusion. 57 (2017).
- [2] M. V. Moro, P. Bauer and D. Primetzhofer, Phys. Rev. A 102 (2020).

* E-mail: eduardo.pitthan@physics.uu.se

Irradiação de materiais astrofísicos por íons e elétrons: simulações em laboratório

E. F. da Silveira*

PUC-Rio, Rio de Janeiro, Brasil

Uma teoria plausível para a origem da vida baseia-se na hipótese de que reações químicas induzidas por agentes ionizantes cósmicos promoveram um aumento gradativo na complexidade e organização das substâncias que compõem os seres vivos. As seções de choque desses processos podem ser medidas em laboratório. Feixes de íons (keV – GeV), de elétrons (dezenas de eV -keV) e de fótons (UV – RX) são os agentes ionizantes. Misturas de gases (condensados ou não) de moléculas simples como H₂O, CO, NH₃, etc. e moléculas prebióticas são os alvos; suas temperaturas variam de 10 a 300 K. Espectroscopia óptica (especialmente no infravermelho) e espectrometria de massa são duas das técnicas analíticas apropriadas para monitorar as transformações químicas. As medidas das seções de choque para a vasta faixa de energia necessária, para um número enorme de alvos e de temperaturas são um desafio enorme mas que pode ser significativamente reduzido com o uso de modelos teóricos.

Neste trabalho é apresentado um resumo do que o Grupo fez nos últimos anos. Os feixes usados foram He⁺ (keV), H⁺, He⁺ e N^{q+} (MeV), Xⁿ⁺ (50-500 MeV) e elétrons (200-1000 eV). As amostras prebióticas são GLY, ALA, PHE e bases nitrogenadas do DNA.

O principal resultado encontrado foi que, para íons de MeV, as seções de choque (σ) de destruição e de formação moleculares obedecem a uma lei de potência com o stopping power (S_e), cujo coeficiente de proporcionalidade é o inverso da densidade de energia média para dissociar a molécula (ρ_E):

$$\sigma(\text{cm}^2) = (S_e)^n (\text{keV}/\mu\text{m}) / \rho_E (\text{eV}/\text{nm}^3),$$

onde $n \sim 1$ para prebióticos e $n \sim 1.5$ para gases condensados [1]. Energias típicas para dissociar

aminoácidos estão na faixa de 10 a 15 eV. Para íons de keV e para feixes de elétrons, parece haver um limiar inferior no stopping power para a dissociação (ex.: GLY, Fig. 1).

O modelo SRIM/CASINO-estendido, desenvolvido para a determinação mais precisa de seção de choques de alvos espessos, será também apresentado [2].

Colegas do Grupo apresentarão resultados específicos deste trabalho.

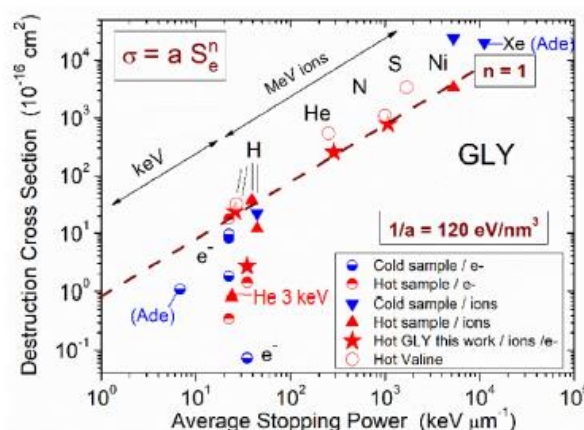


Fig. 1. Dependência da seção de choque de destruição da glicina (σ) em função do stopping power eletrônico (S_e). Para feixe de íons de MeV, $\sigma \sim S_e$. [1]

Agradecimentos: CNPq, FAPERJ e CAPES.

Referências

- [1] C. A. P. da Costa *et al*, Mon. Not. R. Astron. Soc. **502**, 2105–2119 (2021)
- [2] C. A. P. da Costa *et al*, Mon. Not. R. Astron. Soc. **511**, 4031–4043 (2022)

* E-mail: enio@vdf.fis.puc-rio.br

Fotofragmentação e Fotoionização do CH_2FCF_3 na Valência e na Borda do Carbono

Aline Medina^{a,1}, I. Prazeres^a, V. Morcelle^b, V. S. A. Bonfim^a, R. R. T. Marinho^c, M. C. M. Costa^a, L. C. Ribeiro^d, M. S. Arruda^d, L. A. V. Mendes^e, M. J. Santos^f, A. C. F. Santos^a

^a Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil

^b Departamento de Física, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Seropédica, RJ, Brasil

^c Instituto de Física, Universidade de Brasília, Brasília, DF, Brasil

^d Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, Salvador, BA, Brasil

^e Departamento de Ciências Exatas, Biológicas e da Terra, Universidade Federal Fluminense, Santo Antônio de Pádua, RJ, Brasil

^f Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sertão de Pernambuco, Ouricuri, PE, Brasil

Os hidrofluorocarbonetos (HFCs) foram escolhidos como alternativa ambientalmente mais adequada aos CFCs. Por não conter cloro, não contribuem diretamente para a destruição do ozônio na estratosfera. O CH_2FCF_3 (1,1,1,2-Tetrafluoretano, também conhecido como HFC-134a, R134a, SUVA-134a ou Freon-134a) é o HFC mais amplamente utilizado. Discutiremos sua dinâmica de ionização e fragmentação por fótons de 12 eV até 320 eV.

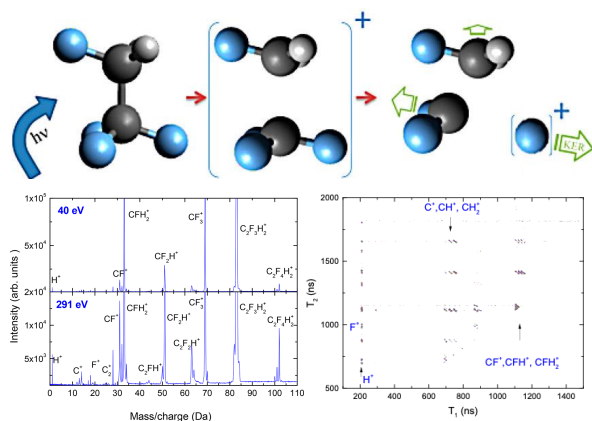


Fig. 1. Espectros PEPICO e PEPIPO.

O experimento foi realizado na linha TGM do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS, Campinas - Brasil). O tempo de voo de um ou dois fragmentos iônicos foi medido em coincidência com os elétrons ejetados (técnicas PEPICO e PEPIPO).

¹E-mail: alinemedina@if.ufrj.br

Vimos que na região da borda K do Carbono a seletividade da excitação é favorecida pelos ambientes químicos distintos que cercam os átomos $\text{C}(\text{F}_3)$ e $\text{C}(\text{H}_2\text{F})$ [1, 2]. Analisamos a média da energia cinética liberada (KER), assim como a distribuição KER (KERD) [2].

Também mostramos como a dupla fotoionização do CH_2FCF_3 na valência pode ser descrita como uma soma dos processos shake-off (SO) e knockout (KO) [3].

Analisamos as intensidades relativas dos pares de íons produzidos em coincidência. E, por fim, inferimos os caminhos da fotofragmentação mais prováveis a partir do formato e inclinação dos picos dos espectros de dupla coincidência seguindo o método proposto por Eland [4, 5].

References

- [1] V. Morcelle *et al* *J. Phys. Chem. A* 122, 9755-9760 (2018).
- [2] Víctor S. A. Bonfim *et al* *Molecular Physics* e2100836 (2022).
- [3] Viviane Morcelle *et al* *Rapid Commun Mass Spectrom.* 35, e9132 (2021).
- [4] J. H. D. Eland, F. S. Wort e R. N. Royds *Eletron Spectrosc. Relat. Phenom.* 41, 297 (1986).
- [5] A. Medina *et al* to be published.

Impacto de elétrons em gases e filmes moleculares condensados de benzeno e nitrilas: implicações em Titã

Jorge H. Basílio*, Roberto Nascimento, Lucia Coutinho, Fabio Ribeiro e Wania Wolff

Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil

Titã é o maior satélite de Saturno e tem uma composição de 0.97 de nitrogênio molecular e 0.027% metano e os restantes são preenchidos por outros gases orgânicos, como as nitrilas, (ex. acetonitrila - 3×10^{-6}) e hidrocarbonetos (ex. benzeno 3×10^{-6}); [1]. Em sua atmosfera ocorrem reações químicas induzidas pela radiação solar no lado diurno e por partículas carregadas, elétrons magnetosféricos, prótons e íons advindas de Saturno em seu lado noturno [2,3,4]. Acredita-se que Titã tem uma atmosfera parecida à Terra primordial antes do surgimento do oxigênio há bilhões de anos [3]. Tanto a acetonitrila quanto o benzeno foram detectados em sua atmosfera em [5,6,7] contudo, as presenças foram confirmadas pela sonda espacial Cassini. A presença das moléculas em Titã e a detecção da benzonitrila no meio interestelar, na nuvem TCM-1 [8], nos motivou a buscar, e mostrar a formação da benzonitrila. Experimentos mostraram que o benzeno na fase gasosa ao ser exposto a uma descarga forma hidrocarbonetos como o bifenil e o fenilacetileno [10]. Um experimento similar com a benzonitrila como precursora é interessante, devido sua detecção em TCM-1, e do fenilacetileno ter uma estrutura similar a da benzonitrila.

Na primeira etapa do projeto medimos as seções de choque de ionização e fragmentação do benzeno, acetonitrila e benzonitrila em fase gasosa em uma larga faixa energética de elétrons (20-2000 eV). Os valores absolutos das seções de choque foram normalizados a cálculos da seção de choque total de ionização [10]. A partir dos dados e dos fluxos de elétrons incidentes em Titã em altitudes de 1000 km [11,12] determinamos a meia vida das moléculas em altitudes de maior fração molar [1]. Na uma segunda etapa realizamos experimentos, em fase condensada, com benzeno e com a mistura ben-

zeno e acetonitrila dando ênfase na redução da água no sistema experimental e no filme condensado. A molécula da água tem a característica de engaiolar as moléculas levando à redução das interações intermoleculares e de reações químicas entre as espécies [13]. Nesses experimentos realizados em uma temperatura de 110 K e pressão de 1×10^{-9} mbar, elétrons de 2300 eV, incidem sobre filmes finos de 10 monocamadas. Espécies protonadas da benzonitrila, do bifenil, são emitidas dos filmes de acetonitrila e benzeno e, tropílio e naftaleno do filme puro de benzeno. Medidas das abundâncias destes agregados evidenciam que o benzeno é o precursor de hidrocarbonetos policíclicos e derivados e que a formação de benzonitrila em Titã é viável [1]. O objetivo maior e a longo prazo é mostrar rotas de formação de moléculas complexas no meio interestelar e em Titã, para sugerir como surgiram moléculas de relevância à formação da vida, como de aminoácidos.

Referências

- [1] V. Vuitton et al, *Icarus* **191**, 722-742 (2007)
- [2] F. Raulin et al, *Chem. Soc. Rev.* **41**, 5380-93 (2012).
- [3] F. Raulin et al, *Adv. Space Res.* **338**, 149-160 (1992).
- [4] G. Gronoff et al, *A & A* **506**, 955-964. (2009).
- [5] A. Coustenis et al, *Icarus*, **161**, 383 (2003).
- [6] D B. Bézard et al, *Bull. Am. Astron. Soc.*, **25**, 1100 (1993)
- [7] JH Waite et al, *Science* **316**, 870-5. (2007)..
- [8] BA McGuire et al, *Science* **359**, 202-205 (2018).
- [9] A.K. Lemmens et al, *Nat Commun* **11**, 269 (2020).
- [10] S Singh et al *J. Chem. Phys.* **145**, 0340309 (2016).
- [11] P. Lavvas et al, *Icarus* **213**, 233–251 (2011).
- [12] M.S. Richard et al, *J. Geophys. Res. Space Physics*, **120**, 1281– 1298 (2015).
- [13] Ryutaro Souda, *Journal of Phys.Chem. C* **120**, 934-943 (2016).

* E-mail: jorgehenriquebasilio@hotmail.com

Trascendiendo la aproximación “parámetro de impacto” en colisiones atómicas por impacto de proyectiles pesados

R. O. Barrachina^{† 1}, T. A. Guarda[†]

[†] *Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica, 8400 Bariloche, Río Negro, Argentina*

La así llamada aproximación parámetro de impacto es tan antigua como la misma teoría de colisiones. Ya había sido empleada en el año 1930 por “Coen” Brinkman y “Hans” Kramers en cálculos de la sección eficaz de captura de electrones en colisiones de partículas alfa contra átomos [1]. Pero, quizá, la justificación mas conocida la dio Gian Carlo Wick en una nota al pie agregada por J. David Jackson y Schiff a la prueba de galera de su conocido artículo de 1954 [2]. Allí se dice que “en un calculo exacto del proceso de captura, la interacción entre núcleos y partículas incidentes dará una contribución insignificante del orden de (m/M) . Esto puede ser observado mas fácilmente considerando que los núcleos son infinitamente pesados y planteando el problema como un cálculo de parámetros de impacto”. Esta aproximación, en la que se considera que el sistema formado por el proyectil y el núcleo del blanco sigue una trayectoria clásica rectilínea y uniforme, fue y continua siendo ampliamente utilizada en una gran variedad de modelos teóricos

que describen las colisiones por impacto de partículas pesadas. Obviamente esta aproximación falla a grandes ángulos [3], pero se espera que sea valida si la deflexión del proyectil es pequeña (como propone Wick, del orden de m/M). En esta comunicación exploraremos la validez de esta y otras suposiciones usuales, tanto desde un punto de vista comparativo de esta teoría semiclásica con su versión completamente cuántica, como a la luz de resultados experimentales recientes (ver p. ej. [4]).

References

- [1] H. C. Brinkman and H. A. Kramers *at al Proceedings Koninklijke Akademie van Wetenschappen* 33: 973 (1930)
- [2] J. D. Jackson and H. Schiff *Phys. Rev.* 89: 359 (1953)
- [3] L. Sarkadi et al., *Phys. Rev. A* 58: 296 (1998); J. Fiol, V. D. Rodríguez and R. O. Barrachina, *J. Phys.* 34: 933 (2001)
- [4] M. Dhital et al., *Phys. Rev.* 102 032818 (2020)

¹E-mail: raul.barrachina@gmail.com

Todo es cuestión de fases: retardos temporales y hologramas en fotoionización.

S. D. López*¹ y D. G. Arbó*[†]

* *Instituto de Astronomía y Física del Espacio (Conicet-UBA), Buenos Aires, Argentina*

† *Universidad de Buenos Aires, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Ciclo Básico Común, Buenos Aires, Argentina.*

Cuando un átomo se encuentra sometido a la acción de un láser intenso se ioniza por efecto túnel o mediante la absorción de uno o más fotones. Cada uno de estos mecanismos tiene lugar en mayor o menor medida dependiendo de la oscilación del láser con respecto a la revolución del electrón (parámetro de Keldysh). La Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo describe exactamente estos procesos representando al electrón dispersado como un paquete de ondas, cuya fase contiene la información de estructuras de interferencia de muy distinta naturaleza.

En esta charla se discutirá en profundidad tanto para la fotoemisión por efecto túnel, como en el caso multifotónico para pulsos de uno y dos colores, donde suele asociarse el tiempo de retardo de Wigner para caracterizarla [1-3]. La principal distinción para las estructuras de interferencia estriba en su naturaleza: - **Interferencias temporales**: los electrones son emitidos en diferentes partes del pulso llegando al detector con igual momento. - **Interferencias espaciales**: los electrones interfieren entre sí debido a diferencias de caminos o trayectorias.

Como ejemplo, en las Figuras. 1(a-c) se muestran el campo eléctrico del láser y los espectros fotoelectrónicos para la emisión de un átomo de hidrógeno bajo la acción un pulso linealmente polarizado. Éstos fueron calculados mediante las aproximaciones de campo fuerte (SFA) [1], que no incluye la interacción con el núcleo y el modelo semiclásico de dos pasos (SCTS) [2], que sí lo hace. Entre las interferencias temporales encontramos las inter-ciclo en forma de anillos concéntricos modulados por franjas de interferencia intra-ciclo casi verticales, como puede verse en la Figura 1 (b) y (c). Las inter-

ferencias espaciales, se aprecian como franjas casi paralelas al eje horizontal de la Fig. 1 (c), correspondiente al eje de polarización.

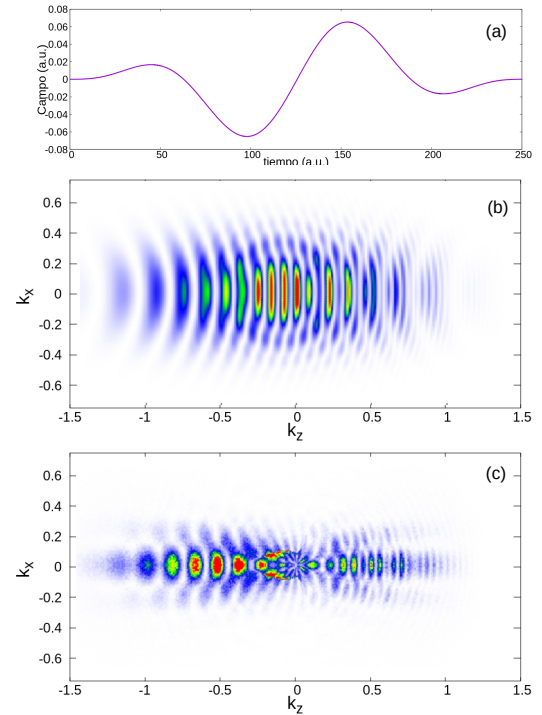


Fig. 1. (a) Campo eléctrico como función del tiempo de un pulso con frecuencia $\omega = 0.05$ a.u. e intensidad $F_0 = 0.075$ a.u.. Espectros fotoelectrónicos como función de los momentos k_x y k_z calculados mediante SFA (b) y SCTS (c).

References

- [1] Arbó, D. G. et al., Phys. Rev. A.; **74**, 021403 (2006)
- [2] López, S. D. et al.; Phys. Rev. A; **104**, 043113 (2021)
- [3] López, S. D.; Arbó, D. G. Phys. Rev. A; **100**, 023419 (2019)

¹E-mail: sebastlop@iafe.uba.ar

Cálculo de secciones eficaces de ionización múltiple de moléculas tipo Ne por impacto de iones livianos: H₂O y CH₄

M. E. Galassi^{1*}, V. B. Tessaro^{1,2}, B. Gervais³, M. Beuve²

¹Grupo de Física Biomédica, Instituto de Física de Rosario (CONICET-UNR) y Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura, Universidad Nacional de Rosario, Argentina.

²Université de Lyon 1, CNRS/IN2P3, Institut de Physique des 2 Infinis de Lyon, France.

³Centre de Recherche sur les Ions, les Matériaux et la Photonique, CIMAP-CIRIL-Ganil, CEA/CNRS/ENSICAEN/Université de Caen-Basse Normandie UCBN, France

En este trabajo presentamos un modelo teórico simple para calcular las secciones eficaces de ionización múltiple de moléculas tipo Ne (moléculas con 10 electrones) por impacto de protones e iones livianos. En el modelo se tiene en cuenta tanto la ionización múltiple directa como la emisión post-colisional. La teoría se desarrolla en el marco del Modelo de Electrones Independientes (IEM). Para mantener el modelo lo más simple posible, las probabilidades de partícula simple en función del parámetro de impacto requeridas por el IEM, son representadas por funciones exponenciales decrecientes para cada orbital del blanco. Los parámetros de las funciones exponenciales son obtenidos a partir de las secciones eficaces de ionización neta total para cada orbital, aplicando la aproximación CDW-EIS [1] o el modelo de Rudd [2]. La contribución post-colisional de electrones tipo Auger es considerada teniendo en cuenta las probabilidades experimentales de emisión post-colisional del Ne. Este tratamiento permite una alternativa muy simple a la evaluación de la relajación molecular post-colisional, con resultados en muy buen acuerdo con datos experimentales y con otros modelos teóricos más complejos [3].

En la Figura 1, se muestran secciones eficaces de ionización simple y doble de H₂O y CH₄ por impacto de protones. El caso del agua resulta relevante para investigar los efectos radiobiológicos del impacto de iones sobre la materia viva, por sus aplicaciones en Hadronterapia. Por otra parte, el metano es uno de los principales gases de efecto invernadero. Como puede observarse en la figura, los resultados teóricos presentan muy buen acuerdo con datos experimentales.

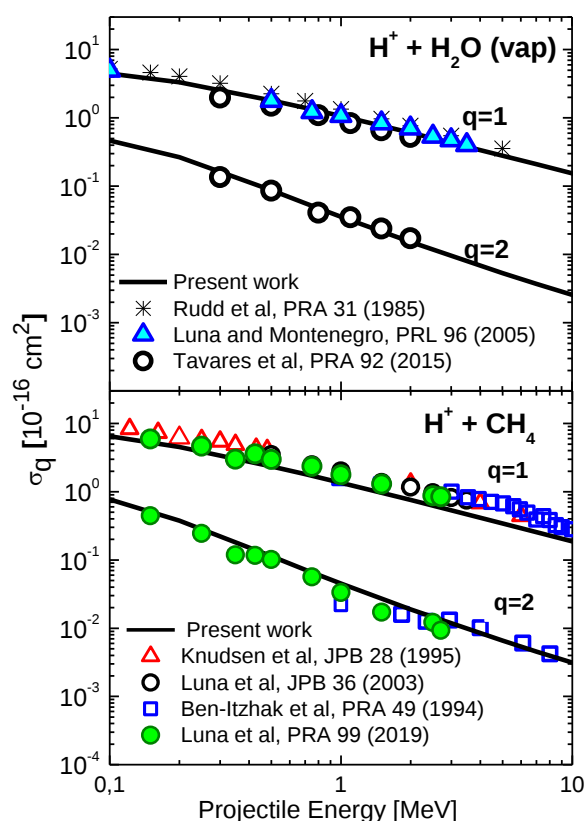


Fig. 1. Ionización simple y doble de H₂O y CH₄ por impacto de protones. Línea negra: presente trabajo.

Referencias

- [1] Galassi *et al*, *Phy. Rev. A* **62** 022701 (2000).
- [2] Rudd *et al*, *Rev. Mod. Phys.* **64**, 441–490 (1992).
- [3] Galassi *et al*, *Phy. Rev. A* **106**, 012823 (2022).

* E-mail: galassi@fceia.unr.edu.ar

Síntese de nanoestruturas induzida por feixes de íons de poucos keV

C. F. S. Codeço¹, S. L. A. Mello², G. M. Penello¹, B. F. Magnani¹, A. C. F. Santos¹, I. D. Barcelos³ e M. M. Sant'Anna^{1*}

¹ Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil

² Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, MG, Brasil

³ Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, Campinas, SP, Brasil

O desenvolvimento de técnicas que usam feixes iônicos com até poucas dezenas de keV para manipulação e análise de superfícies ressaltou a importância do estudo da interação íon-sólido em baixas energias. Exemplos dessas técnicas são *focused ion beam* (FIB) e *helium ion microscopy* (HIM). FIB tipicamente faz uso de projéteis de Ga⁺ com energia de 5 keV, mas projéteis com massas maiores são por vezes utilizados, diminuindo a penetração dos projéteis e aumentando taxas de *sputtering*. HIM trabalha tipicamente com feixes de He de 30 keV. A adaptação da técnica com a troca de He por Ne também é eventualmente feita, reduzindo a penetração do projétil [1].

Neste trabalho são discutidos efeitos da interação de feixes intensos de Cs⁺ de 2 keV com diferentes superfícies, em particular a síntese de nanoestruturas auto-organizadas. Alta massa e baixa energia dos projéteis ($v \sim 0.02 v_{\text{Bohr}}$) resultam em alcances de poucos nanômetros nos alvos, perda de energia nuclear dominante desde as primeiras interações, e alta densidade de energia depositada próxima à superfície.

A formação de ilhas micrométricas de Au cercadas por superfície de Si com textura ondulada de dimensões nanométricas é discutida. A sua síntese é obtida pelo impacto dos íons sobre uma camada bimetálica de Au/Ti, previamente depositada sobre *wafer* de Si, utilizando técnica desenvolvida no Laboratório de Colisões Atômicas e Moleculares (LaCAM) do IF-UFRJ [2].

Auto-organização induzida pelo impacto de íons aparece em dois níveis: (i) surgem texturas onduladas no *background* de Si que apresentam assinaturas no espaço dos momentos, analisadas a partir de imagens de microscopia de força atômica [3] e (ii) Uma lei de potência descreve a distribuição de volumes das ilhas de Au espalhadas sobre a superfície de Si, analisada a partir de perfilometria ótica em 3D [4]. A lei de potência observada é comparada a leis de po-

tência obtidas na fragmentação de sistemas macroscópicos nos quais grande quantidade de energia é depositada na periferia de um corpo. O papel do desmolhamento (*dewetting*) na fragmentação das ilhas é também explorado.

A incidência do mesmo feixe de Cs⁺ de 2 keV sobre um filme amorfo de SiO₂ resulta na síntese de nanocristais de Si (SiNC) próximos à superfície. Uma reação de desproporcionamento de subóxido de Si fornece um caminho para sua síntese. São explorados o papel do sputtering preferencial e do curto alcance dos projéteis na síntese das nanoestruturas. A técnica de análise *synchrotron infrared nanospectroscopy* (SINS) é usada para investigar a presença de impurezas e defeitos nos SiNCs sintetizados. A modelagem teórica da interação de radiação infravermelha de campo próximo com a amostra, comparada com os dados experimentais, indica a presença nos SiNCs de defeitos formados pela combinação de impurezas de oxigênio e vacâncias no Si [5].

Referências

- [1] F. I. Allen, *Beilstein J. Nanotechnol.* **12** 633 (2021).
- [2] S. L. A. Mello, C. F. S. Codeço, B. F. Magnani, and M. M. Sant'Anna, *Rev. Sci. Instrum.* **87** 063305 (2016).
- [3] C. F. S. Codeço, S. L. A. Mello, B. F. Magnani, and M. M. Sant'Anna, *Nanotechnology* **31** 255302 (2020).
- [4] C. F. S. Codeço, S. L. A. Mello, B. F. Magnani, and M. M. Sant'Anna, *Materialia* **20** 101214 (2021).
- [5] C. F. S. Codeço, I. D. Barcelos, S. L. A. Mello, G. M. Penello, B. F. Magnani, A. C. F. Santos, and M. M. Sant'Anna, *Appl. Surf. Sci.* **601** 154190 (2022).

* E-mail: mms@if.ufrj.br

Interacción de partículas cargadas con materiales bidimensionales modelados como osciladores electrónicos

S. Segui^{*1}, J. L. Gervasoni[†], N. R. Arista[†], Z. L. Mišković[‡]

^{*} Instituto de Física Enrique Gaviola (CONICET-UNC), Córdoba, Argentina

[†] Centro Atómico Bariloche (CNEA) e Instituto Balseiro. S. C. de Bariloche, Argentina

[‡] University of Waterloo

Las propiedades electrónicas y ópticas de estos sistemas los convierten en materiales ideales para aplicaciones en optoelectrónica, almacenamiento de energía y biosensores. Una herramienta útil para explorar dichas propiedades es la interacción con partículas cargadas rápidas (electrones o iones). La descripción de las pérdidas de energía resultante de este proceso proporciona información valiosa en este sentido.

En este trabajo presentamos una adaptación del modelo de osciladores electrónicos al caso de materiales bidimensionales, desarrollando una formulación para calcular la pérdida de energía de la partícula incidente. Los electrones del material se representan como un arreglo plano de osciladores armónicos (isotrópicos o anisotrópicos) cuyas frecuencias de oscilación están dadas por las propiedades del material. La partícula incidente transfiere energía a dichos osciladores a través de su campo electromagnético a lo largo de su trayectoria. Usando este modelo, obtenemos varias expresiones analíticas para la pérdida de energía como función de los parámetros físicamente relevantes del sistema, tales como la velocidad de la partícula incidente y la densidad electrónica del material.

Para el caso del grafeno, aplicamos la formulación anisotrópica del modelo ya que los electrones de valencia involucrados están limitados a moverse dentro del plano de la monocapa. Consideramos dos regímenes de frecuencias: el rango óptico y el rango de frecuencias del THz [2]. En ambos regímenes calculamos el stopping power y la pérdida total de energía de electrones incidiendo en

trayectorias paralela y perpendicular respectivamente. En la figura 1 mostramos las contribuciones de los osciladores π y σ a la pérdida de energía por unidad de camino de una partícula en trayectoria paralela en función de la velocidad y el parámetro de impacto.

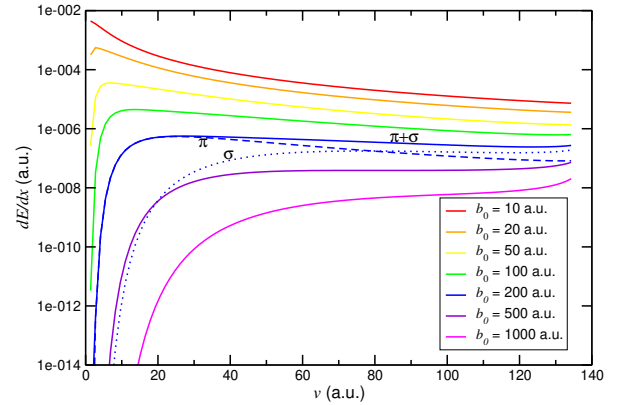


Fig. 1. Stopping power dE/dx como función de la velocidad en el régimen óptico, para distintos parámetros de impacto.

El presente modelo de osciladores muestra un buen acuerdo con el método dieléctrico [3], de amplia validación, y su versatilidad permite abordar otros materiales bidimensionales con características singulares, como el fosforeno.

References

- [1] S. Segui *et al*, *Nucl. Inst. Meth. B* 490, 18 (2021)
- [2] Z. Mišković *et al*, *Phys. Rev. B* 94, 125414 (2016)
- [3] S. Segui *et al*, *J. Appl. Phys.* 130, 114302 (2021)

¹E-mail: silvinasegui@gmail.com

Structural characterization of a Pt ultra-thin films by electron and ion based

H. Trombini^{1*}, F. F. Selau², C. W. Basso², P. L. Grande², M. Vos³, J. Morais²

¹Universidade Federal de Ciências da Saúde de Porto Alegre, Porto Alegre-RS, Brazil

²Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre-RS, Brazil

³Department of Materials Physics, Australian National University, Canberra, Australia

The precise characterization of ultra-thin films is crucial in several industries, e.g., semiconductor and disk drive data storage. The analysis of such samples by ion-beam and electron-spectroscopic techniques has been a centerpiece for this industry and the material science community. Understanding how elemental composition varies with depth (depth profiling) and how these elements are distributed over the substrate (e.g. island versus layer-by-layer growth mode) is indispensable to achieve well-characterized and precise manufacture of ultra-thin films [1].

In this work, we applied angle-resolved X-ray photoelectron spectroscopy (ARXPS), medium energy ion scattering (MEIS) and electron Rutherford backscattering (eRBS) to investigate a nominal 2 nm thick platinum film deposited by DC-sputter over a native silicon dioxide on a silicon substrate [2, 3, 4]. In order to show a typical result obtained, Figure 1 presents the experimental (a) and simulated (b) MEIS 2D map of ion scattering intensities as a function of the scattering angle and energy for the 200 keV H⁺ incoming beam impinging along the surface normal. With these three techniques, the structural characterization of this sample was achieved, which means that these techniques provided the thickness and the distribution over the substrate of this ultra-thin Pt layer.

A Monte Carlo code was developed in order to analyze the ARXPS data. Chi-square analysis was applied for the platinum islands height and the substrate coverage. The disagreement on the nanostructures distribution and

size obtained from these techniques was less than 11%.

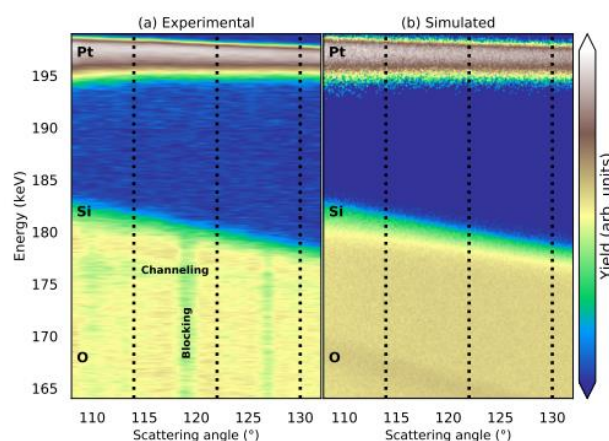


Fig. 1. Experimental and simulated 2D-map of the proton yield as a function of the backscattered energy and angle for the 200 keV H⁺ incident beam. The signals from ions scattering off Pt, Si and O are indicated as well as the reduction of the intensities due to channeling and blocking effects. The color maps represents the backscattered proton yield.

These techniques are a powerful tool for structural characterization of ultra-thin films even when these films are distributed as nanostructures, a common situation in the first phases of ultra-thin film growth for many materials.

Referencias

- [1] W. J. Min et al, *Surface and Interface Analysis* 51 (7) 712–721, (2019).
- [2] C. R. Brundle et al, *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* 178, 433–448, (2010).
- [3] M. R. Went and M. Vos, *Applied physics letters* 90 (7), 072104, (2007).
- [4] H. Trombini et al, *Scientific Reports* 9 (1) 1–7, (2019).

* E-mail: henrique.trombini@ufcsa.edu.br

Guiding of highly charged ions through capillaries in insulating materials: experiments and simulations

Nikolaus Stolterfoht *

Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie, 14109 Berlin, Germany

After the first observation [1] that keV ions are guided through insulating nanocapillaries, the topic has received considerable attention during the past decade. These capillaries are nanotubes with a diameter of about 100 nm and a length of about 10 μm . The essential property of the capillary guiding is a self-organizing process, which governs the charge deposition inside the capillaries [1,2]. With increasing deposition of the ions, the charge patch increases until the electrostatic field is large enough to deflect the ions. At equilibrium, the ions are guided maintaining their incident charge state.

Milestones of the field concerning experiments and simulations are presented in accordance with a recent review over the field of capillary guiding [3]. Experiments are described giving emphasis to the guiding of highly charged ions in the keV energy range. Recent experiments with a single straight macrocapillary are treated allowing for the control of conductivity by changing the temperature of the material [4]. Single tapered capillaries are discussed involving an enhancement of the beam density and the production of a microbeam for biological applications. These studies have motivated several groups devoting efforts to the production of a beam with diameter of the submicron scale.

Apart from the experimental studies, theoretical concepts of the capillary guiding are discussed. Fig. 1 shows results of calculations using a drift model for trajectories

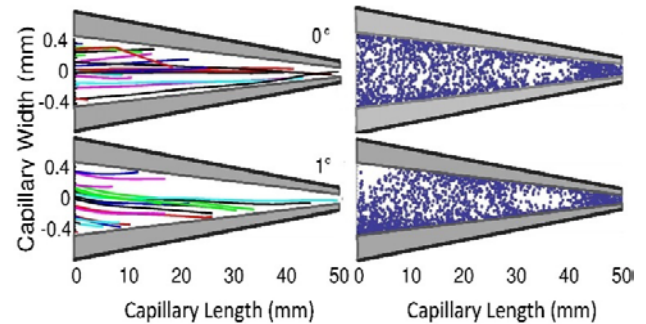


Fig. 1: Calculations of 4.5-keV Ar^{7+} ions incident at 0° and 1° into a conical capillary [5].

and charge distributions for 4.5-keV Ar^{7+} incident under 0° and 1° into a conical microcapillary [5]. The simulations show that the density of the transmitted ions is enhanced by a factor as large as 4. This results are of importance for the biological applications mentioned. Altogether, it is shown that capillary guiding involves several novel phenomena whose understanding has made essential progress.

Referencias

- [1] N. Stolterfoht *et al.*, Phys. Rev. Lett. **88**, 133201 (2002).
- [2] K. Schiessl *et al.*, Phys. Rev. A **72**, 062902 (2005).
- [3] N. Stolterfoht and Y. Yamazaki, Physics Reports **629**, 1-107 (2016).
- [4] Gruber *et al.*, Nucl. Instr. Methods B **314**, 1 (2014).
- [5] N. Stolterfoht *et al.* Phys. Rev. A **91**, 32709 (2015).

* E-mail: nico@stolterfoht.com

CIENCIA Y TECNICA EN EL RIO DE LA PLATA DEL VIRREINATO A LA INDEPENDENCIA

C. R. Garibotti*

¹ *Instituto Balseiro, Bariloche, Argentina*

Haremos una cronología de la evolución de las ciencias y sus aplicaciones desde la creación del virreinato del Río de la Plata hasta 1828 con el fin de la Confederación Argentina. Describiremos como la creación del virreinato implicó un fuerte impulso a la economía y la cultura del Río de la Plata. Uno de los problemas más importantes de ese período era la delimitación de la frontera entre España y Portugal, para resolverlo hubo un flujo de técnicos, en particular ingenieros militares, que luego se aquerenciaron en la región. La creación del Protomedicato provocó una mejora notable en los niveles de sanidad de las ciudades, control de las actividades médicas y farmacéuticas, y creó la Escuela de Medicina.

Después de la revolución de mayo este bagaje profesional disponible permitió la creación de la Escuela de Matemáticas, continuación de

la de Náutica, y la Academia de Geometría y Dibujo impulsados por Belgrano. En tanto la Escuela de Medicina se convierte en el Instituto Médico-Militar a cargo de Cosme Argerich. En un área más técnica se desarrolló la fabricación de armamento, Holmberg en Tucumán, Beltrán en Mendoza y De Luca en Buenos Aires.

En el ámbito educativo, mientras que en matemática aplicada, se alcanzaron niveles equivalentes a los europeos, en física se mantuvo alto el nivel de disquisición filosófica alejado de la observación experimental. Recién en 1821, con la creación de la Universidad de Buenos Aires y la contratación de científicos del exterior, la matemática y la física dejaron de ser materias auxiliares de las aplicaciones técnicas hasta lograr su individualidad profesional.

* E-mail: crgaribotti@yahoo.com

RESÚMENES DE LOS POSTERS

Quantum interferences govern phase delays in ω - 2ω strong field ionization

Diego G. Arbó^{1,2*}, Sebastián D. López¹

¹*Instituto de Astronomía y Física del Espacio – IAFE (UBA-Conicet) Buenos Aires, Argentina*

²*Universidad de Buenos Aires, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Ciclo Básico Común, Buenos Aires, Argentina*

In this work, we develop a strong-field non-perturbation theory of the electronic photo-emission process in atomic hydrogen due to a two-color for visible frequency and its first harmonic ω - 2ω [Ti:Sapphire laser (800 nm) together with the first harmonic (400 nm)] linearly polarized short laser pulse in the multiphoton regime. We introduce a general theory based on the saddle point approximation (SPA) to study phase delays of photoelectrons. We focus on the extraction of the phase shifts using directional emission in the forward direction. We calculate the ionization time of each interfering electron trajectory, analyzing the dependence of the electron emission as a function of the relative phase between the ω - 2ω fields within the strong field approximation.

We consider a vector potential of the form $A(t) = -[F_{2\omega}/(2\omega)\sin(2\omega t) + F_{\omega}/\omega\sin(\omega t + \phi)]$. Within the SPA, electron yield stem from the coherent superposition of semiclassical trajectories. The energy spectrum in the forward direction as a function of the relative phase ϕ between the two colors within the SPA is depicted. All multiphoton peaks (ATIs and sidebands) are present in the intercycle factor in Fig. 1a with separation of one ω photon energy, which is independent ϕ , as expected. The interhalfcycle factor can be observed as a 2π -periodic function in Fig. 1b. The interplay between the inter- and interhalfcycle interferences is plotted in Fig. 1c where both ATI peaks and sidebands are present. We see that the first multiphoton peak just above the threshold ($E_n=0.035$ a.u.) is an ATI peak with $\phi_0=\pi/4$ and $5\pi/4$. In turn, the first sideband at $E_{13}=0.085$ maximizes at $\phi_0=3\pi/4$ and $7\pi/4$.

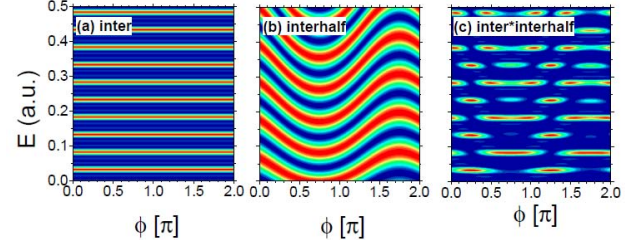


Fig. 1: Normalized energy distributions (SPA) in the forward direction as a function of ϕ . (a) Intercycle factor, (b) interhalfcycle factor, (c) (a) $\times$ (b).

We focus on the extraction of the phase delays accounting the electron forward emission along the direction of the polarized electric fields. Phase delays calculated within our SPA agree not only with our SFA calculations (not shown) but also with previous perturbation theories [1,2] if the probe field amplitude is much weaker than the pump pulse. The extension of perturbative theories to the strong-field approximation gives rise to novel effects for intermediate and high electron energies like the departure of the sinusoidal behavior of the intensity of ATIs and sidebands as a function of the relative phase ϕ . This results in the splitting of the maxima of ATIs and sidebands as a function of ϕ , as observed in Fig. 2c, which force us to revise the extraction method of phase delays for strong field ionization.

Work supported by PICT-2020-01434 2020-01755 2017-2945 and of ANPCyT (Argentina).

Referencias

- [1] López S. D. *et al.*, Phys. Rev. A **104**, 043113 (2021).
- [2] Bertolino M. and Dahlström J. M., Physical Review Research **3**, 013270 (2021).

* E-mail: diego@iafe.uba.ar

Fragmentação de moléculas aromáticas sob colisão de He^{2+} : revisita experimental e teórica

Wania Wolff¹, Volker Dangendorf², Gehard Hilgers², Ulrich Giesen²,
Jorge H. Basilio^{1*}, Lucia H. Coutinho¹, Fabio A. Ribeiro³,
Alejandra Mendez⁴, Sebastian Lopez⁴, Claudia Montanari⁴

¹Instituto de Física Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil

²Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Braunschweig, Alemanha

³Instituto Federal do Rio de Janeiro, Nilópolis, Rio de Janeiro, Brasil

⁴Instituto de Astronomia e Física del Espacio, (CONICET) Buenos Aires, Argentina

Moléculas aromáticas são de interesse multidisciplinar como em bio-, atmosférica- e astroquímica e são consideradas resistentes à fragmentação ao impacto de íons na faixa de energia intermediária. Pirimidina ($\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2$), piridina ($\text{C}_5\text{H}_5\text{N}$) e benzonitrila ($\text{C}_6\text{H}_5\text{CN}$) foram selecionadas respectivamente como moléculas representativas nos campos relacionados. A importância na medição da ionização e subsequente fragmentação dessas moléculas tem sido destacada em muitos trabalhos associados à terapia de hádrons [1], formação de nuvens [2,3] e formação de hidrocarbonetos aromáticos no meio interestelar [5] e objetos planetários [6].

Neste trabalho relatamos a fragmentação de moléculas aromáticas sob colisão de H^+ e He^{2+} em uma ampla faixa de energias de impacto de 40 a 150 keV e 700 a 6000 keV, respectivamente, usando feixes de íons e campos de extração pulsados combinados com um espectrômetro de tempo de voo de alta resolução (reflectron). Há poucos estudos experimentais explorando a fragmentação de moléculas aromáticas após interação de íons nesta faixa de energia. Anteriormente, por exemplo, seções de choque de fragmentação foram medidas somente para pirimidina sob impacto de prótons para algumas energias de 300 keV a 16000 keV [1].

Uma comparação entre projéteis H^+ e He^{2+} mostra a influência da energia de impacto e o papel do estado de carga nos canais de fragmentação. Procurando por efeitos de carga so-

bre os canais de ionização e fragmentação, comparamos os dados de He^{2+} com aqueles medidos de prótons de 50 a 150 keV e elétrons de 20 a 2000 eV que colidem com essas moléculas aromáticas.

Para entender o comportamento geral das seções de choque íon-moléculas aromáticas, incluímos resultados teóricos para a ionização simples e captura de elétrons destas espécies, combinando a seção de choque atômica de seus constituintes com uma abordagem estequiométrica [7]. Estes valores atômicos foram obtidos dentro dos métodos CTMC e CDW-EIS e são examinados para sondar a importância do fenômeno de captura de elétrons em energias de impacto que variam de 25 keV a 250 keV. Os dados derivados deste estudo podem ajudar a melhorar as estimativas dos modelos astrofísicos, biológicos e atmosféricos.

Referências

- [1] B. Rudek, *et al*, Eur. Phys. J. D **69**, 237 (2015).
- [2] P. C. J. Biban, *et al*. Eur. Phys. J. D **75**, 57 (2021).
- [3] Booyens, *et al*, *Atmosphere* **10**, 492 (2019).
- [4] Brett A. McGuire *et al*. Science **359**, 202 (2018).
- [5] F.J. Crary *et al.*, Planetary and Space Science **57** 1847–1856, (2009).
- [6] M. S. Richard *et al.*, Journal of Geophysics Research and Space Physics, **120**, 1-18 (2015).
- [7] A. M. P. Mendez, C. C. Montanari, J. E. Miraglia, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **53**, 055201 (2020).

* E-mail: jorgehenriquebasilio@hotmail.com

Aromatic molecules revisited under H^+ and He^{2+} collision: theory and experiment

**Wania Wolff¹, Jorge H. Basilio^{1*}, Volker Dangendorf², Gehard Hilgers², Ulrich Giesen²,
Lucia H. Coutinho¹, Fabio A. Ribeiro³, Alejandra Mendez⁴, Sebastian Lopez⁴,
Claudia Montanari⁴**

¹*Instituto de Física Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil*

²*Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Braunschweig, Alemanha*

³*Instituto Federal do Rio de Janeiro, Nilópolis, Rio de Janeiro, Brasil*

⁴*Instituto de Astronomia e Física del Espacio, (CONICET) Buenos Aires, Argentina*

Moléculas aromáticas são de interesse multidisciplinar como em bio-, atmosférica- e astroquímica e são consideradas resistentes à fragmentação ao impacto de íons na faixa de energia intermediária. Pirimidina ($C_4H_4N_2$), piridina (C_5H_5N) e benzonitrila (C_6H_5CN) foram selecionadas respectivamente como moléculas representativas nos campos relacionados. A importância na medição da ionização e subsequente fragmentação dessas moléculas tem sido destacada em muitos trabalhos associados à terapia de hádrons [1], formação de nuvens [2,3] e formação de hidrocarbonetos aromáticos no meio interestelar [5] e objetos planetários [6].

Neste trabalho relatamos a fragmentação de moléculas aromáticas sob colisão de H^+ e He^{2+} em uma ampla faixa de energias de impacto, ou de 40 a 150 keV e 700 a 6000 keV, respectivamente, usando feixes de íons pulsados e campos de extração combinados com uma alta resolução espectrômetro de tempo de voo (reflectron). Há poucos estudos experimentais explorando a fragmentação de moléculas aromáticas após interação de íons nesta faixa de energia. Anteriormente, por exemplo, seções de choque de fragmentação foram medidas para pirimidina sob impacto de prótons para algumas energias de 300 keV a 16000 keV [1].

Uma comparação entre projéteis H^+ e He^{2+} mostra a influência da energia de impacto e o papel do estado de carga nos canais de fragmentação. Procurando por efeitos de carga sobre os canais de ionização e fragmentação,

comparamos os dados de He^{2+} com aqueles medidos de 50 a 150 prótons keV e 20 a 2000 elétrons eV que colidem com essas moléculas aromáticas.

Para entender o comportamento geral das seções de choque íon-moléculas aromáticas, incluímos resultados teóricos para a ionização simples e captura de elétrons destas espécies, combinando a seção de choque atômica de seus constituintes com uma abordagem estequiométrica [7]. Estes valores atômicos foram obtidos dentro dos métodos CTMC e CDW-EIS e são examinados para sondar a importância do fenômeno de captura de elétrons em energias de impacto que variam de 25 keV a 250 keV. Os dados derivados deste estudo podem ajudar a melhorar as estimativas dos modelos astrofísicos, biológicos e atmosféricos.

..

Referencias

- [1] B. Rudek, *et al*, Eur. Phys. J. D **69**, 237 (2015).
- [2] P. C. J. Biban, *et al*. Eur. Phys. J. D **75**, 57 (2021)
- [3] Booyens, *et al*, *Atmosphere* **2019**, 10, 492
- [4] Brett A. McGuire *et al*. Science **359**, 202 (2018)
- [5] F.J. Crary *et al.*, Planetary and Space Science 57 1847–1856, (2009).
- [6] M. S. Richard *et al.*, Journal of Geophysics Research and Space Physics, 120, 1-18 (2015)
- [7] A. M. P. Mendez, C. C. Montanari, J. E. Miraglia, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **53**, 055201 (2020) .

* E-mail: jorgehenriquebasilio@hotmail.com

As potencialidades do ultrassom como alternativa ao ataque químico para microestruturas escrita por feixes de prótons

Deiverti de Vila Bauer^{1*}, Rafaela Debastiani², Claudia Telles de Souza, Livio Amaral, Johnny Ferraz Dias³

¹ Universidade Federal do Rio Grande do Sul (Instituto de Física da UFRGS)

² Institute of Nanotechnology, Karlsruhe Institute of Technology

³ Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Nós exploramos as potencialidades do uso de ondas de ultrassom como tratamento pós-irradiação após a microestruturação em PTFE pela técnica de *proton beam writing* (PBW). Para isso, folhas de PTFE de 2 mm de espessura foram irradiadas com prótons de 2,2 MeV com corrente média de 50 pA. Estruturas de linha reta foram padronizadas no polímero com um feixe de prótons focado de $3,5 \times 3,5 \mu\text{m}^2$. Polímeros pós-irradiação foram colocados em um banho a 60°C e imersos em água destilada e em uma solução 6 M de NaOH sob a ação de ondas de ultrassom de 40 kHz para a fabricação das estruturas. Os resultados indicam que a água destilada submetida a ondas ultrassônicas é muito eficiente na remoção de estruturas rugosas criadas pela irradiação de prótons e assim proporcionando uma boa razão de aspecto às microestruturas por PBW. Por outro

lado, o uso de NaOH 6 M em vez de água não melhorou a qualidade das estruturas com o feixe de prótons. Os resultados são discutidos em termos dos parâmetros que caracterizam a interação das ondas de ultrassom com o meio líquido e o polímero.

Referências

- [1] D. de Vila Bauer, R. Debastiani, C. Telles de Souza, L. Amaral, J. Ferraz Dias, J. Appl. Polym. Sci. 2022, e52407. <https://doi.org/10.1002/app.52407>
- [2] C. T. de Souza, E. M. Stori, L. A. Boufleur, R. M. Papaléo, J. F. Dias, Appl. Phys. A: Mater. Sci. Process. 2016, 122, 122.
- [3] E. M. Stori, C. T. De Souza, J. F. Dias, J. Appl. Polym. Sci. 2016, 133, 1

* E-mail: deiverti.bauer@ufrgs.br

Ion irradiation effects in InGaSb films

C. A. Bolzan^{1*}, L.T.Rossetto¹, R.Giulian¹

¹Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Here we show that it is possible to manufacture polycrystalline $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ ($x = 0.5, 0.6, 0.8$ and 1) films, deposited by magnetron sputtering, whose lattice parameter (and therefore bandgap) can be modulated through the In/Ga ratio in this alloy. As a possible efficiency thermoelectric material, $\text{In}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Sb}$ exhibited the highest ZT values (0.53 at 450 K), which is a very promising result, especially considering the relatively low measurement temperature. When irradiated by Au^{+6} ions of 16 MeV, this alloy presents anomalous behaviors, characteristic of antimonides, such as thickness expansion, amorphization and pore formation from a certain fluence, which strongly depend on the In/Ga ratio in the compound[1]. This dependence, however, is not stoichiometric, i.e, does not follow the Vegard's law as observed in the isovalent $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{Sb}$ ternary alloy[2] as shown in fig.1, which has the same crystalline structure.

$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ after ion irradiation also showed to be remarkably stable under annealing in vacuum at 200 °C, with very small changes in atomic concentration induced by thermal annealing. Concerning the ZT parameter, it was obtained that its value substantially decreased after ion irradiation.

These results show that ion irradiation effects in $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ films deposited by mag-

netron sputtering have potential application in gas sensor devices, however, the same is not observed for thermoelectric material.

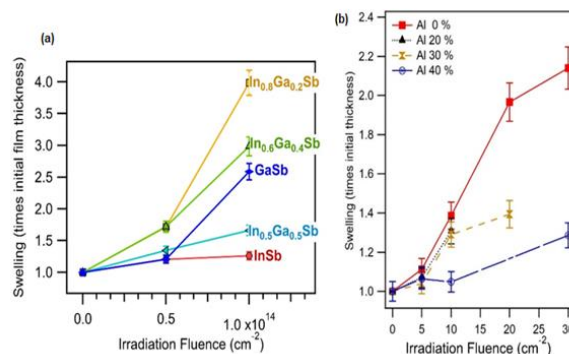


Fig. 1. Swelling as a function of irradiation fluence for (a) $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$ and (b) $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{Sb}$ films irradiated with 16 MeV and 14 MeV Au ions. Film thicknesses were measured directly from scanning electron microscopy micrographs.

References

- [1] Giulian R. *et al*, *Thin solid films* **753** (2022)
- [2] Bolzan C.A *et al*, *J. Phys.Chem.Solids* **148** (2021).

* E-mail: charlesbolzan@yahoo.com.br

Develando plasmones de superficie en el MoS₂

P. Buitrago^{*1}, S. Montoro^{*}, S. Rodríguez^{*}, E. Albanesi^{*}, G. Ruano[†],
R. Vidal^{*}, and F. Bonetto^{*}.

^{*} Instituto de Física del Litoral (Conicet-UNL), Santa Fe, Argentina

[†] Centro Atómico Bariloche (CNEA) - Conicet, S.C. de Bariloche, Argentina

Diversas investigaciones acerca del sulfuro de molibdeno (MoS₂) han surgido a lo largo de los años dado su amplio rango de aplicaciones. En particular, se ha utilizado como lubricante seco y como componente para la fabricación de dispositivos tanto electrónicos como optoelectrónicos [1]. Básicamente, estas aplicaciones se deben a que el MoS₂ es un material que, estructuralmente, se caracteriza por formar capas dobles que interactúan entre sí a través de fuerzas débiles de tipo van der Waals [2], factor esencial que permite reducir su dimensión y por lo tanto modificar sus propiedades electrónicas [3].

Con el propósito de aportar a la discusión alrededor de los procesos físicos que surgen de la interacción de partículas cargadas con un sólido, se presentan resultados experimentales de un análisis por espectroscopía de pérdida de energía de electrones reflejados (REELS). A partir de variar el ángulo (0° y 30°) y la energía de los electrones incidentes (80 - 500 eV) se logran discriminar las pérdidas electrónicas debidas a contribuciones del volumen y de la superficie de una muestra de MoS₂. Para respaldar los resultados previamente obtenidos, se realiza una comparación (Fig. 1) con la función de pérdida de energía (ELF), calculada desde primeros principios en el marco de la Teoría del Funcional de la Densidad, haciendo uso del método de ondas planas implementado en el código Quantum ESPRESSO (QE) [4]. Adicionalmente, se complementa el análisis con espectroscopía de fotoelectrones emitidos por Rayos X. De este modo, se pone de manifiesto la importancia de la técnica REELS y la fiabilidad de los

modelados teóricos para predecir propiedades de los materiales.

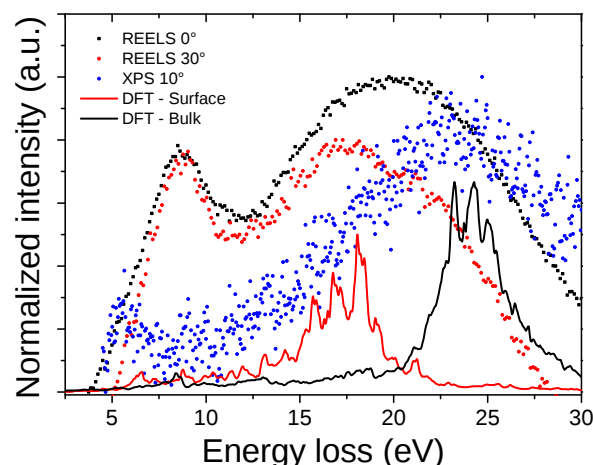


Fig. 1. Comparación de espectros de pérdidas de energía para el MoS₂. Las líneas sólidas representan los cálculos por DFT de las ELFs. Las restantes son obtenidas mediante a) REELS, excitando al MoS₂ con electrones a 100 eV que incidieron a 0° (curva negra) y a 30° (curva roja); b) por XPS (curva azul). Los espectros REELS fueron normalizados a la intensidad del pico de cero pérdida.

References

- [1] D. Gupta *et al* *Inorg. Chem. Commun.* 121, 108200 (2020)
- [2] G. Dickinson *et al* *J. Am. Chem. Soc.* 45, 6, 1466–1471 (1923)
- [3] F. Mak *et al* *Phys. Rev. Lett.* 105, 136805 (2010)
- [4] P. Giannozzi *et al* *J. Phys.: Condens. Matter* 21, 395502 (2009)

¹E-mail: paula.buitrago@santafe-conicet.gov.ar

Radiólise de valina por elétrons de keV

C.A.P da Costa¹, E. F. da Silveira²

¹Centre de recherche sur les Ions, les MATériaux et la Photonique (CIMAP – GANIL), Caen França

²Departamento de Física Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro Brasil

A detecção de aminoácidos em meteoritos e cometas [1,2] trouxe discussões a respeito de como estes materiais são produzidos em ambientes inóspitos como o meio interestelar. Por estarem expostos à radiação ionizante nesses locais, o conhecimento de sua radioresistência é fundamental para prever suas meias-vidas. Além disso, aminoácidos, combinados com outras moléculas encontradas em meios extraterrestres, podem ter tido um papel importante nos estudos sobre as origens da vida na Terra primitiva.

A radiólise de L-valina por feixes de elétrons de keV é analisada em laboratório, a 10 e 300 K. As evoluções da densidade da coluna durante a irradiação são medidas por espectroscopia no infravermelho e seções de choque de destruição são extraídas [3]. Os dados mostram que, em geral, as seções de choque de destruição dependem da energia do projétil, espessura da amostra, temperatura e fluência. Além disso, é proposto um modelo para descrever a destruição da valina em função da profundidade e fluência da amostra; as previsões são comparadas com os resultados experimentais. Conforme mostrado na Figura 1, para um filme fino (~16 nm), uma boa concordância é encontrada para a evolução da densidade da coluna precursora com a fluência, com a energia do projétil e com a espessura da amostra. Para filmes espessos, o modelo superestima a degradação da amostra, sugerindo que a amostra cresceu com uma amorfização distinta. O modelo utiliza os resultados do código CASINO [4] para determinar a distribuição de energia depositada na

amostra. Como implicações astrofísicas, prevê-se a radiólise da valina dissolvida em gelo de H₂O e blindada por uma camada de CO₂, como uma tentativa de analisar a degradação de materiais realistas por elétrons keV.

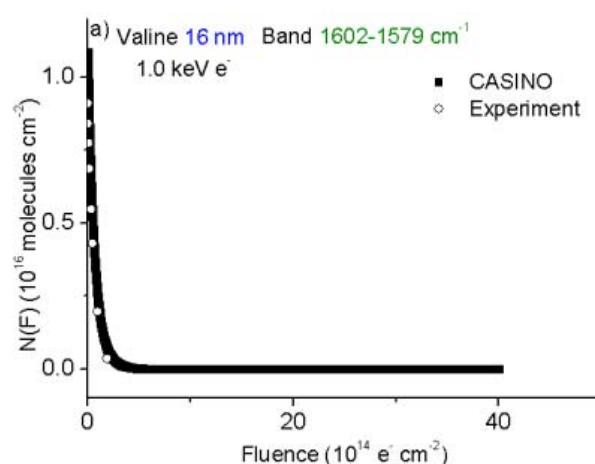


Fig. 1. Evolução da densidade de coluna com a fluência de um feixe de 1.0 keV de elétrons para resultados experimentais (círculo vazio) e as previsões do modelo baseado no código CASINO para uma amostra de 16 nm.

Referências

- [1] Sandford S.A. et al. *Science* (2006); 314, 1720–1724 160.
- [2] Elsila J. E, Glavin D. P, & Dworkin J. P. *Meteoritics & Planetary Science* (2009); 44(9), 1323-1330.
- [3] da Costa C.A.P. and da Silveira E.F. *MNRAS* (2022); 511, 4031-4043.
- [4] Hovington P., Drouin D., and Gauvin R. *Scanning* 19.1 (1997): 1-14.

* E-mail: enio@vdbg.fis.puc-rio.br

ESTUDO DA RADIÓLISE DE MOLÉCULAS SÓLIDAS de N₂O POR ESPECTROSCOPIA DE INFRAVERMELHO

R.C. Pereira^{1*}, A.L.F. de Barros², E.F.da Silveira¹

¹Departamento de Física, Centro Federal de Educação Tecnológica Celso Suckow da Fonseca (CEFET/RJ)

²Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro (PUC-Rio)

Moléculas que contém N-O são consideradas importantes precursoras astroquímicas de espécies prebióticas. É evidente que a compreensão da química do nitrogênio e do oxigênio no espaço é um passo importante para ligar a origem e a evolução das espécies prebiótica e biótica à evolução dos mantos de grãos interestelares, dos cometas e das superfícies congeladas dos corpos do Sistema Solar exterior. Neste trabalho, a amostra de N₂O, à 11 K, foi irradiada pelo feixe de 1,5 MeV ¹⁴N⁺ do Van de Graaff da PUC-Rio, até a fluência máxima de $1,32 \times 10^{13}$ íons cm⁻². O fluxo médio de íons na amostra durante os experimentos foi de $3,0 \times 10^{10}$ íons cm⁻² s⁻¹. As amostras foram analisadas utilizando a técnica de Espectrometria de Infravermelho por Transformada de Fourier (FTIR) cujos espectros de infravermelho (IR) foram adquiridos na faixa de 4000-500 cm⁻¹. A identificação das moléculas precursores e seus produtos formados pela irradiação, além da determinação das seções de choque de compactação, destruição e formação dos produtos sintetizados pela radiólise foram analisados.

Foram observados e determinados as taxas de destruição de N₂O, bem como a taxa de produção e destruição das espécies filhas produzidas (isto é, NO, NO₂, N₂O₂, N₂O₃, N₂O₄, N₂O₅ e O₃) (Fig.1). Os valores da seção de choque de destruição do precursor (σ_d) e da densidade de coluna inicial (N_0) utilizados foram os da banda principal (ν_1 - 1294 cm⁻¹) do N₂O, cujos valores são, $\sigma_d = 2,3 \times 10^{-14}$ cm² e $N_0 = 4,5 \times 10^{18}$ moléculas cm⁻².

No caso das moléculas produzidas durante a radiólise, as seção de choque de destruição (σ_d), e a seção de choque de compactação (σ_c) para cada modo de vibração observado na matriz de gelo de N₂O foram determinadas.

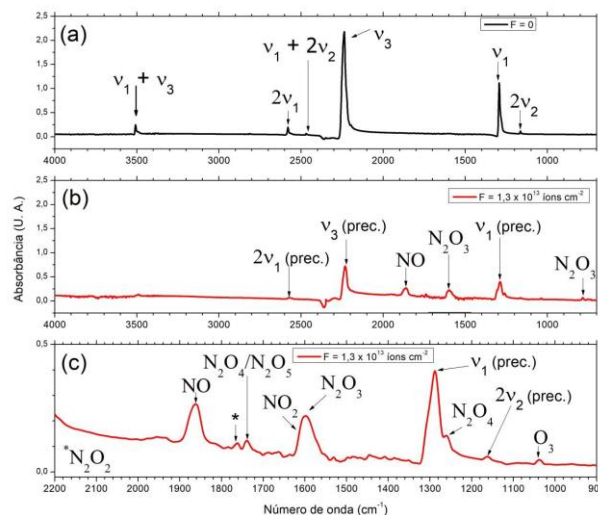


Figura 1: Espectros IR da radiólise do N₂O: (a) espectro do gelo não irradiado; (b) espectro após a irradiação de $1,3 \times 10^{13}$ íons cm⁻² e (c) zoom do espectro (b), na faixa de 2200 - 900 cm⁻¹.

Com o estudo das reações físico-químicas induzidas pela irradiação iônica do N₂O, na fase sólida, obtivemos: (a) o óxido de nitrogênio mais abundante gerado é o NO₂, seguido pelo NO, N₂O₃, N₂O₂, O₃, N₂O₄ e N₂O₅ respectivamente; (b) os valores de $\sigma_d \sim 0,25 \times 10^{-13}$ cm²; (c) valores de σ_c obtidos estão compreendidos em uma faixa entre $1,9$ e $6,8 \times 10^{-13}$ cm², indicando que a compactação do gelo afeta diferentemente a absorbância de bandas distintas.

Referências

- [1] Pereira, R. C. *et al*, NIMB **460**, 249 (2019).

*E-mail: rodrigocope@gmail.com

Emisión de iones secundarios inducida por fragmentos de fisión de mezclas de gases condensados en hielo de agua

P. R. B. Oliveira^{1*}, R. Martinez², E. F. da Silveira¹

¹ Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rua Marquês de São Vicente, 255, Rio de Janeiro 22452-970, Brazil

² Universidade Federal do Amapá – UNIFAP, Departamento de Física, Rod. Juscelino Kubitschek, km 02, 68903-419, Jardim Marco Zero – Macapá – AP, Brazil

Superficies cubiertas con hielos astrofísicos son uno de los materiales más predominantes en muchos cuerpos del sistema solar, por ejemplo, cometas y objetos transneptunianos. Estos cuerpos están constantemente sujetos al bombardeo por iones del viento solar y rayos cósmicos. Ese bombardeo induce distintas reacciones químicas en el hielo y además de sputtering, suministrando a aquellas exosfera radicales o agregados moleculares iónicos y neutros. El procesamiento energético de estos materiales a baja temperatura ha sido investigado a través de estudios en laboratorio, con el objetivo de analizar los procesos de desorción de iones astrofísicos y de síntesis de nuevas especies moleculares [1]. Se ha observado agua (H_2O) en asteroides, centauros, objetos del disco disperso, objetos transneptunianos y planetas del Sistema Solar. Se espera entonces que, en esos ambientes, los gases condensados como el H_2O sean irradiados por partículas energéticas. Un caso especial ocurre cuando se mezcla H_2O con otros gases, como el etano (C_2H_6) o el óxido nitroso (N_2O), más aun, si la proporción $\text{H}_2\text{O}:\text{C}_2\text{H}_6$ o $\text{H}_2\text{O}:\text{N}_2\text{O}$ es menor que uno. Varios estudios en laboratorio demostraron los efectos del procesamiento energético de los hielos a baja temperatura, como la producción de varias moléculas nuevas y radicales libres, entre ellos H^+ , H_3O^+ , OH^- y O^- . En el presente trabajo, los hielos $\text{H}_2\text{O}:\text{C}_2\text{H}_6$ y $\text{H}_2\text{O}:\text{N}_2\text{O}$, con una proporción de aproximadamente 1:100, son irradiados a una temperatura promedio de 100 K por iones energéticos multicargados (fragmentos de fisión del ^{252}Cf de ~ 65 MeV). Los iones secundarios positivos y negativos pulverizados se analizan mediante espectrometría de masas de tiempo de vuelo (PDMS-TOF)[2]. Se identifican varias es-

pecies iónicas, lo que indica una fuerte fragmentación y reagrupamiento en las superficies. El bombardeo induce la formación de series de agregados iónicos, donde los principales son $(\text{H}_2\text{O})_n\text{X}$, con $\text{X} = \text{H}^+$, H_3O^+ , OH^- y O^- . Sus distribuciones de rendimiento se ajustan mediante la suma de dos exponenciales (Fig. 1.):

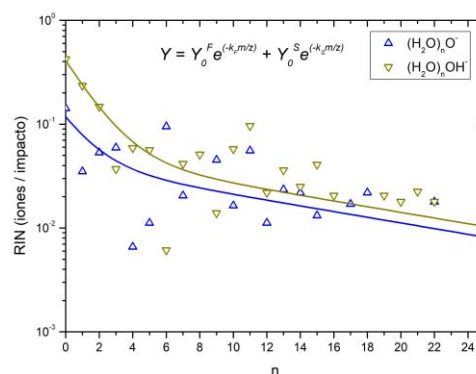


Fig. 1. Rendimientos de iones negativos con racimo $(\text{H}_2\text{O})_n\text{X}$, emitidos por hielo de $\text{H}_2\text{O}:\text{C}_2\text{H}_6$ bombardeado por proyectiles MeV.

Este comportamiento se describe mediante un modelo de emisión de agregados con dos regímenes: rápido (F) y lento (S)[2]. Hemos encontrado que la mayoría de las distribuciones de rendimiento tienen decaimientos exponenciales similares, $k_F = 0.480 \text{ u}^{-1}$ y $k_S = 0.063 \text{ u}^{-1}$. Tal resultado puede ser útil para comprender los procesos por los cuales en el espacio, las especies moleculares ionizadas pasan a la fase gaseosa.

Referencias

- [1] Pereira *et al*, *MNRAS*. **495** 40-57 (2020).
- [2] Oliveira *et al*, *MNRAS*. **502** 1423-1432 (2020).

* E-mail: pabloramonoliveira@gmail.com

Ionización de moléculas de agua líquida por impacto electrónico

M. L. de Sanctis^{1*}, M-F. Politis², R. Vuilleumier³, O. Fojón¹

¹*Instituto de Física, Rosario, Argentina*

²*Laboratoire Analyse et Modélisation pour la Biologie et l'Environnement, Évry, France*

³*Laboratoire École Normale Supérieure, Paris, France*

La ionización de moléculas de agua es una reacción básica de la física atómica, relevante en campos como física médica, astrofísica o física de plasma. Hay numerosos trabajos sobre ionización de moléculas de vapor de agua, incluso, varios que se dedican a estudiar los efectos de las radiaciones ionizantes sobre los tejidos de la materia biológica, pero es necesario considerar la fase líquida, ya que la materia viva esta formada principalmente por agua este estado. Además, es importante determinar la dinámica de los electrones lentos que se producen tras la ionización (electrones llamados secundarios) puesto que pueden ocasionar daños a nivel celular [1].

En este trabajo, presentamos resultados teóricos para la ionización de moléculas de agua en estado líquido por impacto de electrones veloces. El modelo usado para el cálculo de secciones diferenciales múltiples [2,3,4] es perturbativo de primer orden, donde en la función de onda inicial el estado ligado se representa de forma realista con un método de orbitales efectivos desarrollado por Vuilleumier [5]. Consideramos colisiones asimétricas para las cuales en el estado final resultan un electrón dispersado rápido y otro electrón eyectado lento. La interacción de este electrón eyectado con el ión residual se representa por medio de funciones coulombianas.

Las secciones triples diferenciales de ionización de agua líquida mostradas en la figura corresponden a una energía de incidencia de 81 eV, energía de eyección de

5 eV y un ángulo de dispersión igual a -6 grados. Nuestros resultados para el líquido reproducen las características físicas presentes en los experimentos de Ren *et al* [6] con moléculas de vapor de agua, como son la región binaria y de retroceso. Comparamos también, con los datos teóricos para la fase gaseosa de [7].

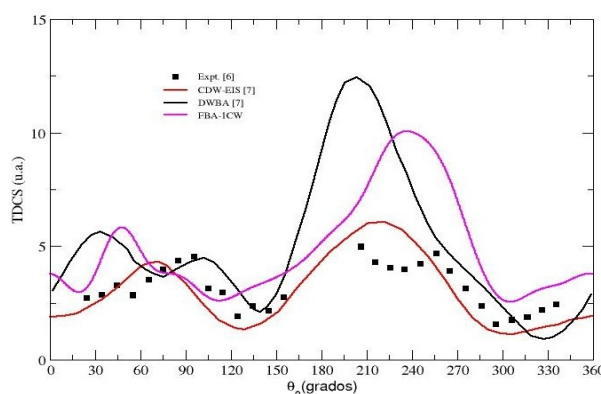


Fig. 1. Secciones eficaces triples diferenciales, en el plano de colisión. Energía de incidencia 81 eV, energía de eyección 5 eV y ángulo dispersión de -6 grados.

Referencias

- [1] Boudaiffa B *et al*, *Science* **287** 1658 (2000).
- [2] de Sanctis ML *et al*, *J. Phys. B* **45** 045206 (2012).
- [3] de Sanctis ML *et al*, *J. Phys. B* **48** 0155201 (2015).
- [4] de Sanctis ML *et al*, *Eur. Phys. J.D* **48** 125 (2017).
- [5] Hunt P *et al*, *Chem. Phys. Lett* **376** 68 (2003).
- [6] Ren *et al*, *Phys. Rev. A* **95** 022701 (2017).
- [7] Acebal *et al*, *Phys. Rev. A* **98** 012703 (2018).

* E-mail: mdesantis@ifir-conicet.gov.ar

Apantallamiento dinámico en proyectiles iónicos y emisión electrónica de encuentro binario

N. J. Esponda¹, M. A. Quinto, R. D. Rivarola, J. M. Monti

Instituto de Física Rosario (CONICET-UNR), Bv 27 de Febrero 210 bis, 2000 Rosario, Argentina

En una colisión entre un ión y un blanco atómico, se denominan electrones binarios (BE) a aquellos electrones del blanco emitidos que sufren una energética colisión con el proyectil, en las que la velocidad de éste es superior a la velocidad orbital de tales electrones. De este modo, la interacción electrón-proyectil resulta más importante que la interacción electrón-blanco. Además, éstas colisiones implican un parámetro de impacto bajo, del orden del radio de la capa K del proyectil iónico. En consecuencia, se espera que la carga nuclear Z_P del proyectil no resulte apantallada por sus electrones ligados y domine la interacción. No obstante, en las secciones eficaces doble diferencial (DDCS) a 0° , la magnitud del pico binario, es decir formado por la emisión BE, depende del grado de ionización q del proyectil. La magnitud del pico BE aumenta a medida que disminuye q , lo que se ha denominado como un efecto de anti-apantallamiento por parte de los electrones ligados al proyectil [1,2].

En un trabajo previo [3] hemos presentado una corrección al modelo de onda distorsionada del continuo con estado inicial eikonal, CDW-EIS, considerando una carga dinámica efectiva para la distorsión del proyectil en el canal de salida. De acuerdo al momento transferido, la carga dinámica puede involucrar distintos grados de apantallamiento de la carga nuclear Z_P .

En este trabajo estudiaremos en mayor detalle el efecto del apantallamiento dinámico sobre la emisión por encuentro binario de un blanco de He. Comparando los nuevos resultados con versiones previas del modelo CDW-EIS [4] y mediciones experimentales [1], encontramos un comportamiento radicalmente diferente, obteniendo ahora un mejor acuerdo

en la magnitud del pico BE.

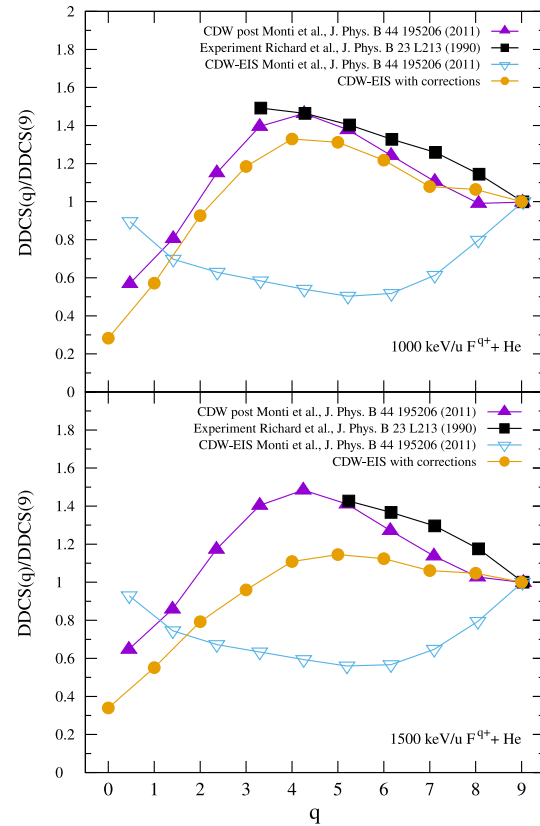


Fig. 1. Magnitud del pico binario en función del estado de carga q del proyectil relativa a la del proyectil desnudo.

References

- [1] P. Richard *et al.* *J. Phys. B* 23, L213 (1990)
- [2] T. J. M. Zouros *et al.* *Phys. Rev. A* 53 2272 (1996)
- [3] N. J. Esponda, M. A. Quinto, R. D. Rivarola and J. M. Monti *Phys. Rev. A* 105, 032817 (2022)
- [4] J. M. Monti *et al.* *J. Phys. B* 44 195206 (2011)

¹E-mail: esponda@ifir-conicet.gov.ar

Efectos de la interacción electrón-electrón en la ionización de He por impacto de Li^{1+} 1s2s y 1s2p

N. J. Esponda¹, M. A. Quinto, R. D. Rivarola, J. M. Monti

Instituto de Física Rosario (CONICET-UNR), Bv 27 de Febrero 210 bis, 2000 Rosario, Argentina

El estudio de la ionización simple del He por impacto de proyectiles de Li^{1+} , en estado fundamental y excitados (1s2s ^1S y 1s2p ^1P), es abordado bajo el modelo de onda distorsionada del continuo con estado inicial eikonal (CDW-EIS). La comparación entre las secciones eficaces doble diferencial (DDCS) calculadas permite elaborar hipótesis sobre la dinámica de la colisión. Además, contrastado con otros estudios teóricos-experimentales de la bibliografía[1,2], este trabajo explora el alcance del actual modelo CDW-EIS aplicado al caso de proyectiles excitados.

En un trabajo previo [3] hemos presentado una corrección al modelo CDW-EIS considerando una carga dinámica efectiva para la distorsión del proyectil en el canal de salida. Mediante el factor de forma del proyectil, la carga dinámica puede considerar distintos grados de apantallamiento de la carga nuclear Z_P de acuerdo al momento transferido en la colisión.

En este trabajo aplicaremos dicha corrección al caso de proyectiles excitados para los cuales hemos además calculado su potencial [4,5]. Comparando las DDCS en función del ángulo para tres energías características de emisión, se observa una mayor contribución en la emisión del blanco a bajas energías para el caso Li^{1+} 1s2p que 1s2s. Entendiendo a los potenciales de sendos proyectiles como una suma de un término de largo rango más otro de corto rango, encontramos que en el término de corto rango radica la causa del incremento en la ionización con Li^{1+} 1s2p en colisiones de gran parámetro de impacto (colisiones blandas). Cabe destacar que los factores de forma de ambos proyectiles excitados son prácticamente iguales en todo su

dominio.

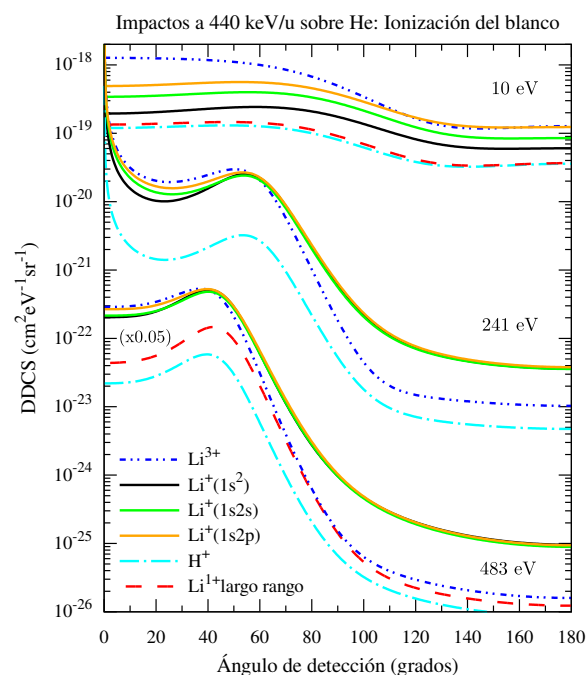


Fig. 1. DDCS de ionización del He para energías de emisión correspondientes a colisiones blandas, captura del continuo y pico binario a 45° .

References

- [1] L. Végh and L. Sarkadi *J. Phys. B* 16, L727 (1983)
- [2] R. D. DuBois and S. T. Manson *Nucl. Instrum. Methods in Physics Research B* 86, 161 (1994)
- [3] N. J. Esponda, M. A. Quinto, R. D. Rivarola and J. M. Monti *Phys. Rev. A* 105, 032817 (2022)
- [4] L. Gulyás *et al.* *Phys. Rev. A* 93, 032704 (2016)
- [5] N. V. Novikov *Int. J. of Math. and Comp. Science* Vol.1 No.2 pp. 55-58 (2015)

¹E-mail: esponda@ifir-conicet.gov.ar

Correlación entre la captura electrónica al continuo y la configuración electrónica de los proyectiles

N. J. Esponda¹, M. A. Quinto, R. D. Rivarola, J. M. Monti

Instituto de Física Rosario (CONICET-UNR), Bv 27 de Febrero 210 bis, 2000 Rosario, Argentina

Como es sabido de la teoría de colisiones atómicas, la interacción entre un electrón emitido del blanco con velocidad similar a la del proyectil, da origen a un pico en el espectro denominado pico de captura electrónica al continuo (ECC). El electrón evoluciona en el campo producido entre el blanco residual y el proyectil, motivo por el cual se dice ser un fenómeno de dos centros. El modelo de onda distorsionada del continuo con estado inicial eikonal (CDW-EIS) describe esta situación proponiendo que la función de onda final del electrón sea el producto de una solución del continuo del blanco residual por otro factor del continuo del proyectil.

En principio se toman ambos continuos como hidrogenicos, pero con cargas efectivas. En un trabajo previo [1], hemos presentado una corrección para el continuo del proyectil en el canal final. Allí se ha definido una carga dinámica efectiva basada en el factor de forma del proyectil, en función del momento transferido de la colisión. De esta manera, la carga dinámica puede tener en cuenta distintos grados de apantallamiento de la carga nuclear Z_P del proyectil. Por ejemplo, su uso permite que el modelo CDW-EIS de cuenta del pico ECC en sistemas con proyectiles neutros.

En este trabajo estudiaremos en mayor detalle el efecto del apantallamiento dinámico sobre la emisión de un blanco de He por impacto de iones O^{7+} , O^{6+} y O^{5+} en estado fundamental y O^{6+} excitados ($1s2s\ ^1S$ y $1s2p\ ^1P$). Se ha calculado el potencial de ambos proyectiles excitados [2,3]. Entendiendo a éste como la suma de un término asintótico más otro de corto rango, se ha visto que el efecto del segundo es despreciable sobre el primero. De este modo, con excepción de la “ladera” de bajas energías del pico ECC, las diferencias observadas en las secciones eficaces doble

diferencial (DDCS) pueden ser atribuibles a diferencias en los factores de forma de cada proyectil. Por ejemplo, puede observarse que para una emisión de 1500 eV, la DDCS de los proyectiles con un solo electrón en su capa K es mayor que la de aquellos con dos electrones, denotando un mayor apantallamiento de éstos últimos. En efecto, los factores de forma de cada proyectil dan cuenta de lo mismo.

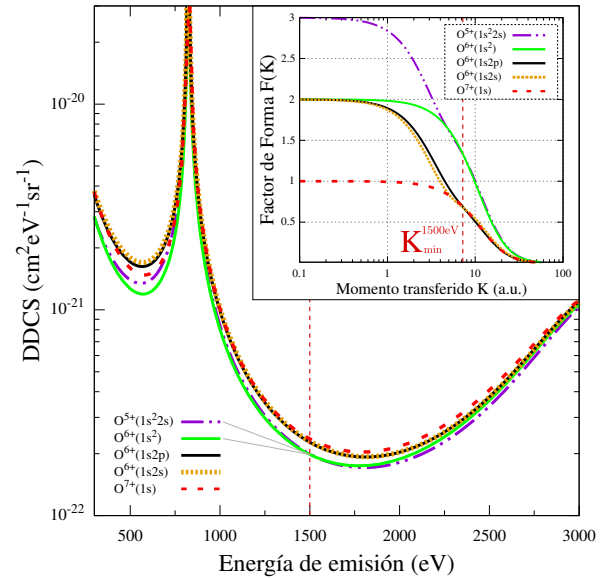


Fig. 1. DDCS de ionización del He a 0° por impactos de iones O^{q+} en estado fundamental o excitado. Recuadro: factor de forma de cada proyectil.

References

- [1] N. J. Esponda, M. A. Quinto, R. D. Rivarola and J. M. Monti *Phys. Rev. A* 105, 032817 (2022)
- [2] L. Gulyás *et al. Phys. Rev. A* 93, 032704 (2016)
- [3] N. V. Novikov *Int. J. of Math. and Comp. Science* Vol.1 No.2 pp. 55-58 (2015)

¹E-mail: esponda@ifir-conicet.gov.ar

Efeitos de *bunching* no straggling eletrônico de H e He na matéria

F.F. Selau¹, A. Molling¹, H. Trombini^{1,2}, R.C. Fadanelli^{1*}, M. Vos³ e P.L. Grande¹

¹Laboratório de Implantação Iônica, Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brazil

²Laboratório de Física Médica, Universidade Federal de Ciências da Saúde de Porto Alegre, Brazil

³Electronic Materials Engineering, Research School of Physics, Australian National University, Australia

O *straggling* de perda de energia é uma quantidade importante que descreve as flutuações de perda de energia de íons que atravessam a matéria [1,2]. Normalmente, a variância σ^2 e a perda de energia média $\langle\Delta E\rangle$ são proporcionais ao comprimento do caminho do íon e, portanto, o efeito das flutuações de perda de energia $\sigma/\langle\Delta E\rangle$ é mais importante para distâncias curtas e energias de projétil baixas e médias.

Nós investigamos, neste trabalho, a dispersão da perda de energia de H e He de baixa e média energia em materiais simples disponíveis e mostramos que a conhecida fórmula empírica de Yang-O'Connor-Wang [3] para a dispersão da perda de energia de prótons na matéria tem uma interpretação física clara. Esta fórmula prevê, em bases empíricas, valores de dispersão de perda de energia que excedem os valores das fórmulas tradicionais de dispersão (por exemplo, as de Lindhard e Chu) em energias em torno de 0,3 MeV/amu por um fator de 2-3. Esse excesso está correlacionado ao efeito de *bunching* [4-6], que vem da característica de não homogeneidade da densidade eletrônica do alvo.

Mostramos que a conhecida fórmula de dispersão de Yang-O'Connor-Wang capturou os efeitos de *bunching* dos dados experimentais de maneira empírica [7]. Esta fórmula foi ainda mais refinada neste trabalho para considerar os dados

experimentais subsequentes. O efeito de *bunching* e o excesso de dispersão são semelhantes entre si e são altamente correlacionados para alvos sólidos e gasosos. Cálculos do *bunching* e estimativa semi-empírica serão apresentados e discutidos na Conferência. A influência dos efeitos de *packing* também foi investigada para sólidos amorfos e policristalinos, resultando em uma influência positiva (i.e., além do previsto por uma distribuição de Poisson) em materiais reais.

Referências

- [1] P. Sigmund, *Particle Penetration and Radiation Effects*, Vol. 1, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, Heidelberg (2006).
- [2] P. Sigmund, *Particle Penetration and Radiation Effects*, Vol. 2, Springer, Berlin (2014).
- [3] Q. Yang, D. O'Connor, Z. Wang. *Nucl. Instr. Meth. B* 61 (2) (1991) 149–155.
- [4] F. Besenbacher, J.U. Andersen, E. Bonderup. *Nucl. Instrum. Methods* 168 (1–3) (1980) 1–15.
- [5] P. Sigmund, A. Schinner. *Eur. Phys. J. D* 58 (1) (2010)
- [6] F.F. Selau, H. Trombini, G.G. Marmitt, A.M.H. de Andrade, J. Morais, P.L. Grande, I. Alencar, M. Vos, R. Heller. *Phys. Rev. A* 102 (3) (2020), 032812.
- [7] F.F. Selau, H. Trombini, R.C. Fadanelli, M. Vos, and P.L. Grande. *Nucl. Instr. Meth. B* 497 (2021) 70-77.

* E-mail: raul@if.ufrgs.br

Imaging and Analysis of Human Glioblastoma U87 Cells Treated with Cisplatin by μ -PIXE

Henrique Fonteles^{*1}, P. L. Grande^{*}, J. F. Dias^{*}, Deiverti Bauer^{*}, Karine Begnini[†], Julia Marcolin[†], Guido Lenz[†]

^{*} Ion Implantation Laboratory, UFRGS, Porto Alegre, Brazil

[†] Cell Signaling Laboratory, UFRGS, Porto Alegre, Brazil

The study of chemotherapy drug's properties plays a vital role in the development of new cancer-related treatments and the improvement of those currently in use. Cisplatin ($\text{Pt}(\text{NH}_3)_2\text{Cl}_2$) and other platinum-based drugs are widely used medications that treat several different cancers, including, but not limited to, ovarian, testicular, and neck [1].

The present work investigated the interaction of cisplatin with human glioblastoma U87 cells. Cells were treated with cisplatin at a concentration of 10, 20, and 100 μM for 24h. The analysis was done using the μ -PIXE technique, with a 2.2 MeV proton beam of $1.2 \times 1.2 \mu\text{m}^2$ spot size, which gave us elemental information about the sample and allowed us to create 2D elemental maps with micrometric spatial resolution. By measuring the chlorine and platinum signals, we were able to identify individual cells in the sample (Fig. 1) and detect which ones had a greater cisplatin uptake, respectively. The study of the drug's uptake is crucial for understanding the mechanisms of resistance that are involved in the cisplatin interaction with cancer cells. Moreover, we noticed that the 100 μM sample had a high iron signal correlating with the platinum signal, which was not present at lower treatment concentrations. This result could be a piece of evidence for ferroptosis, i.e. a type of iron-dependant cell death completely independent from regular apoptosis. Recent studies have already shown that cisplatin can induce ferroptosis in high treatment concentrations [2].

All experiments were conducted at the Ion Implantation Laboratory with a 3MV Tandem accelerator. This work also highlighted the versatility of the μ -PIXE technique and how it can be used to perform interdisciplinary analysis.

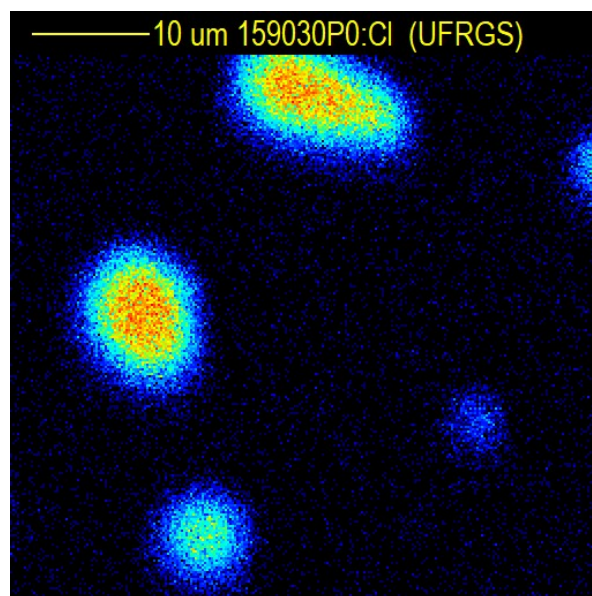


Fig. 1. Chlorine map showing the imaging of individual cells in the sample.

References

- [1] Galanski, M. *Recent developments in the field of anticancer platinum complexes*. Recent patents on anti-cancer drug discovery (2006).
- [2] Guo, J. *et al. Ferroptosis: A Novel Anti-tumor Action for Cisplatin*. Cancer research and treatment (2018).

¹E-mail: fonteleshenrique@gmail.com

Influencia de defectos superficiales en patrones GIFAD

L. Frisco^{1*}, M. S. Gravielle¹

¹*Instituto de Astronomía y Física del Espacio (UBA-CONICET), Buenos Aires, Argentina*

La difracción de átomos rápidos (GIFAD, por sus siglas en inglés) se produce cuando los átomos inciden sobre las superficies cristalinas con energías del orden del keV y ángulos rasantes, del orden del grado [1], siendo un fenómeno fuertemente dependiente de la morfología cristalina y de la distribución electrónica, en particular de la última capa [2,3]. Esta característica lo transforma en una extraordinaria técnica de análisis superficial. Sin embargo, es necesario contar con una superficie con un elevado grado de periodicidad, lo cual es muy difícil de obtener incluso con las técnicas más refinadas, siendo habitual que la superficie presente defectos superficiales.

En este trabajo nos proponemos dar cuenta de cómo las terrazas superficiales alteran los patrones de GIFAD. Para ellos nos hemos valido del método SIVR [4] y de un potencial aditivo de pares [5], aplicados a un sistema en el que átomos de He inciden sobre una superficie de LiF(100) que presenta terrazas ubicadas en distintas posiciones, tanto de manera perpendicular como paralela al eje axial. Para un cristal perfecto, la conservación de la energía (asociada a la dispersión elástica) impone que los máximos de interferencia se distribuyan sobre un anillo, denominado círculo de Laue (Fig. 1 (a)). Pero la presencia de terrazas en el cristal introduce además un fondo difuso, el cual se ubica por encima o por debajo del círculo de Laue para escalones perpendiculares salientes (Fig. 1 (b)) o entrantes con respecto al plano superficial. Dicho fondo es particularmente extenso en

el primer caso, observándose además estructuras de interferencia adicionales, de menor intensidad. Por otro lado, los escalones paralelos al canal de incidencia (Fig. 1 (c)), producen un aumento en la visibilidad de los picos originados por los proyectiles deflectados en el borde del mismo.

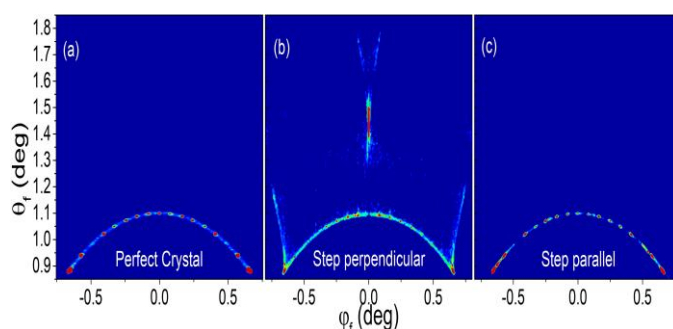


Fig. 1. Distribución de GIFAD para 1.25keV He $\rightarrow$ $\langle 110 \rangle$ LiF(001) con energía normal $E_{\perp}=0.46$ eV.

Referencias

- [1] Schüller A. *et al*, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 016103 (2007); Rousseau A. *et al*, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 016104 (2007).
- [2] Debiossac M. *et al*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23**, 7615 (2021).
- [3] Díaz C. *et al*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **24**, 15628 (2022).
- [4] Frisco L. *et al*, *J. Phys.: Condens. Matter.* **30**, 405001 (2018).
- [5] Miraglia J. *et al*, *Phys. Rev. A* **95**, 022710 (2017).

* E-mail: lfrisco@iafe.uba.ar

Decoherencia por efecto de fonones en colisiones átomo-superficie

L. Frisco^{1*}, M. S. Gravielle¹

¹*Instituto de Astronomía y Física del Espacio (UBA-CONICET), Buenos Aires, Argentina*

La difracción de átomos rápidos desde superficies cristalinas (GIFAD, por sus siglas en inglés) [1] se ha convertido en una poderosa técnica de análisis superficial, que se puede aplicar no solo a temperatura ambiente sino también a temperaturas elevadas. Sin embargo, la mayoría de las descripciones teóricas de GIFAD consideran un cristal ideal y estático [2], mientras que la decoherencia introducida por las vibraciones de la red -fonones- ha sido escasamente estudiada y solo recientemente ha recibido renovada atención [3].

Para describir la contribución de los mecanismos de fonones que intervienen en GIFAD hemos desarrollado la aproximación *Phonon-Surface Initial Value Representation* (P-SIVR) [4], que es un método semicuántico basado en la aproximación SIVR, en el que la representación estática del potencial superficial es reemplazada por un modelo cuántico de oscilador armónico. Dentro de esta aproximación, la probabilidad de dispersión puede expresarse como una serie en términos del número neto de fonones intercambiados durante la colisión, donde el término de primer orden, P0-SIVR, corresponde a la dispersión elástica sin intercambio neto de fonones, pero incluyendo transiciones intermedias.

En este trabajo investigamos la influencia de los mecanismos de fonones en los patrones GIFAD para el sistema He/LiF(001) a temperatura ambiente, centrándonos en la dependencia con la energía perpendicular del proyectil. Si bien en todos los casos las vibraciones térmicas de la red cristalina introducen una amplia dispersión polar en los espectros angulares, pudimos dar cuenta de cómo un mayor acercamiento del proyectil a la superficie es responsable de la disminución en la visibilidad de las estructuras de interferencia, pero no así del ensanchamiento polar, que depende fundamentalmente

de la temperatura, siendo ambos resultados coincidentes con los resultados experimentales disponibles [3,5].

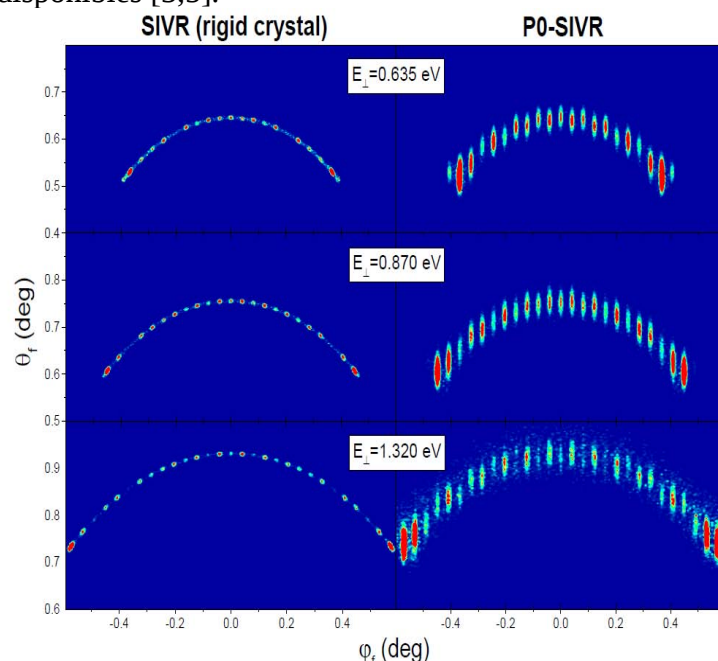


Fig. 1. Distribuciones angulares para 1.25 keV He $\rightarrow$ $\langle 110 \rangle$ LiF(001) con diferentes energías normales $E_{\perp}$.

Referencias

- [1] Schüller A. *et al*, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 016103 (2007); Rousseau A. *et al*, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 016104 (2007).
- [2] Díaz C. *et al*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **24**, 15628 (2022).
- [3] Debiossac M. *et al*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23**, 7615 (2021).
- [4] Frisco L. *et al*, *Phys. Rev. A* **100**, 062703 (2019); Frisco L. *et al*, *Phys. Rev. A* **102**, 062821 (2020).
- [5] Pan P. *et al*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **24**, 12319 (2022).

* E-mail: lfrisco@iafe.uba.ar

Estudio de parámetros físicos relevantes en la dosimetría de referencia para Hadronterapia: poderes de frenado y valores w en aire

V. B. Tessaro^{1,2}, M. E. Galassi^{1*}, B. Gervais³, M. Beuve²

¹Grupo de Física Biomédica, Instituto de Física de Rosario (CONICET-UNR) y Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura, Universidad Nacional de Rosario, Argentina.

²Université de Lyon 1, CNRS/IN2P3, Institut de Physique des 2 Infinis de Lyon, France.

³Centre de Recherche sur les Ions, les Matériaux et la Photonique, CIMAP-CIRIL-Ganil, CEA/CNRS/ENSICAEN/Université de Caen-Basse Normandie UCBN, France

En radioterapia se requiere un conocimiento preciso de la dosis absorbida en el tejido biológico para una correcta predicción de los resultados clínicos. Los equipos empleados para los tratamientos requieren de diversas calibraciones. La calibración de los haces se realiza a través de la dosimetría en condiciones de referencia. El protocolo internacional TRS-398 de la IAEA [1], proporciona una metodología para determinar la dosis absorbida en agua utilizando cámaras de ionización llenas de aire. Para convertir la lectura del dosímetro de aire a agua líquida, se requieren factores de conversión como el cociente de poderes de frenado en agua-aire y los valores w en el aire. El estudio de estos parámetros es relevante ya que son los que más contribuyen a las incertezas en la determinación de la dosis física [1]. Los datos experimentales del valor w para iones rápidos son escasos y los cálculos teóricos son muy complejos, por cual los protocolos de dosimetría internacionales recomiendan valores constantes, independientemente de la calidad del haz (carga y energía).

En este trabajo se presentan resultados del poder de frenado y valores w en aire para protones e iones de carbono rápidos calculados con dos métodos: un método analítico basado en la Aproximación de Frenado Continuo (CSDA) [2] y un código Monte Carlo, MDM [3]. Debido al rango de energías utilizado en la terapia con hadrones (entre 200 y 400 MeV/u), se aplica una aproximación relativista a la energía cinética del proyectil. También se estudia la contribución post-colisión de emisión de electrones Auger. Los resultados obtenidos con ambos métodos tienen muy buena concordancia

entre ellos. El poder de frenado muestra un muy buen acuerdo con los datos recomendados [4] al aplicar la corrección relativista (CSDA-AR) (ver Figura). Los valores w calculados dependen fuertemente de la emisión Auger y de las secciones eficaces de excitación utilizadas. Al comparar estos resultados con los recomendados en aire [1,4] se encontró un 6% de discrepancia. Por lo tanto, son necesarios datos experimentales más precisos y secciones eficaces de excitación confiables, que permitan alcanzar la precisión requerida para determinar la dosis.

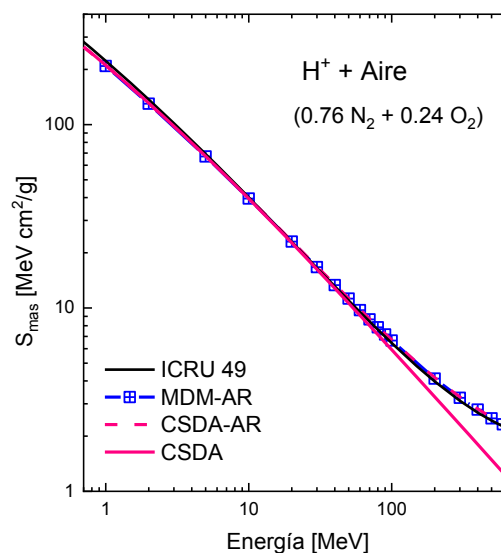


Fig1: Poderes de frenado en aire calculados con la CSDA y el Monte Carlo MDM. Se comparan con datos recomendados [4].

Referencias

- [1] IAEA TRS-398. (2000)
- [2] Inokuti, M. *Radiation Research* 64 (1975)
- [3] Tessaro, V. *et al. Physica Medica* 88 (2021)
- [4] ICRU 49 (2015), 73 (2005).

Transferencia de carga en colisiones H^+ -grafeno : efecto de la presencia de adsorbatos alcalinos

M. A. Romero^{1,2}, F. Bonetto^{1,2}, E. A. García^{1*}

¹*Instituto de Física del Litoral (IFIS, UNL-CONICET), Santa Fe, Argentina*

²*Departamento de Física, Fac. de Ing. Química, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Argentina*

Se presenta un estudio teórico de la colisión frontal de protones (H^+) con una superficie de grafeno con impurezas alcalinas adsorbidas (Na, K y Cs), en el límite de bajo recubrimiento. Se estudia cómo afecta la presencia de los adsorbatos en el intercambio de carga cuando la colisión binaria ocurre entre el protón y el adsorbato o entre el protón y diferentes átomos de carbono cercanos a la impureza.

El sistema interactuante se describe con el Hamiltoniano de Anderson [1], el cual tiene en cuenta la repulsión electrónica en el sitio de valencia tipo-s del proyectil. Las fracciones de carga (neutra y negativa) después de la colisión se calculan usando el formalismo de funciones de Green-Keldysh fuera del equilibrio [2]. Desde el punto de vista adiabático, se describe la adsorción de átomos alcalinos sobre la superficie usando también el Hamiltoniano de Anderson incluyendo la repulsión coulombiana en el orbital de valencia tipo-s del alcalino. Las densidades de estado local y parcial (LDOS) proyectadas en el átomo alcalino y en los átomos de carbono cercanos a la impureza, se obtienen usando el formalismo de funciones de Green (transformando Fourier) [3]. El modelo requiere el conocimiento de la matriz densidad de la superficie de grafeno limpio, la cual se obtiene usando el código Fireball [4].

Los resultados de este trabajo [3] muestran que los estados internos de los átomos alcalinos adsorbidos sobre grafeno introducen importantes diferencias en la transferencia de carga dependiendo de su posición con respecto a la banda de valencia del grafeno. En la dispersión por el adsorbato, se observa una dependencia

oscilatoria de las fracciones de carga en función de la energía incidente del ion, debida a la estructura de picos que introduce en la matriz densidad combinada, grafeno+impureza alcalina, la presencia del adsorbato. Cuando la colisión es con un átomo de carbono, el comportamiento oscilatorio de las fracciones de carga se atenúa. En este caso la banda del grafeno se vuelve más activa en el proceso de intercambio de carga. Se observa un significativo decrecimiento en la formación de iones negativos ya que la banda vacía del grafeno favorece los procesos de pérdida de electrones.

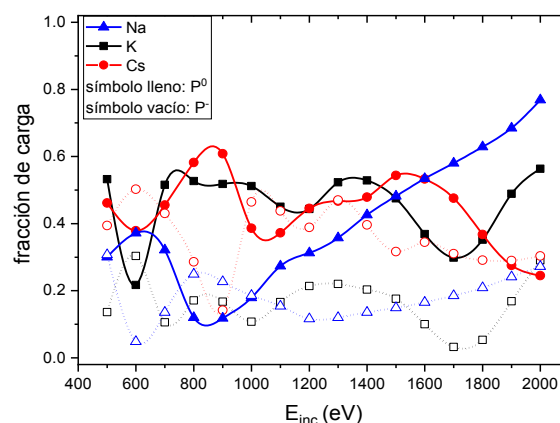


Fig. 1. H^+ dispersado por el átomo adsorbido.

Referencias

- [1] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **123** 41 (1961).
- [2] L. V. Keldysh, *Sov. Phys. JETP* **20** 1515 (1965).
- [3] M. A. Romero *et al.*, *Phys. Rev.* **B100** 085432 (2019); *Surf. Sci.* **721** 122070 (2022).
- [4] P. Jelinek *et al.*, *Phys. Rev.* **B71** 235101 (2005).

* E-mail: evelina.garcia@santafe-conicet.gov.ar

Fragmentos e agregados iônicos de acetonitrila e metanol em fase condensada por impacto de elétrons energéticos

André M. R. Giraldi^{1*}, Jorge H. Basílio¹, Michelle Baschin³, Fabio Ribeiro² e Wania Wolff¹

¹*Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil*

²*Instituto Federal do Rio de Janeiro, Nilópolis, Rio de Janeiro, Brasil*

³*Berlin University of Applied Science, Berlin, Germany*

As moléculas de metanol e acetonitrila são espécies orgânicas de importância prebiótica, desempenhando um papel vital na criação da química necessária para a existência da vida. O metanol e a acetonitrila são respectivamente o mais simples álcool, CH₃OH, e a mais simples nitrila, CH₃CN. Um conhecimento da interação de moléculas em sólidos moleculares é objeto de estudo sob várias perspectivas, inclusive apresentando relevância na ciência espacial. A presença das moléculas em ambientes astroquímicos, como a Nebulosa de Órion, o disco protoplanetário TW-Hydrae e na lua de Saturno, Titã, motivou a investigação da interação entre as mesmas [1]. A incidência de elétrons em metanol condensado, em condições semelhantes ao ISM, produziu uma variedade de produtos, incluindo glicerol, enquanto em diferentes nitrilas resultou na detecção de aminoácidos em laboratório.

Sondar a interação da acetonitrila com metanol sem a presença de água tem sido um tema desafiador, já que a água tem a característica de encapsular as moléculas [2,3]. Inicialmente, aplicamos a espectroscopia de massa por tempo de voo e a dessorção programada por temperatura em metanol e acetonitrila pura para determinar o padrão de fragmentação e formação de agregados das moléculas isoladamente. Dois regimes de deposição e crescimento dos filmes condensados foram aplicados para sondar suas interações no estado sólido: bi-camada e co-deposição.

No primeiro regime, as moléculas sublimadas são depositadas sequencialmente formando filmes sobrepostos e no segundo, são injetadas simultaneamente na fase gasosa e

um filme dessa mistura é formado. Os experimentos foram realizados em uma temperatura de 120K e pressão de base de 1×10^{-9} mbar, com pressões de injeção dos compostos da ordem de 1×10^{-7} mbar. Selecionando-se o metanol-d₄ (CD₃OD) e a acetonitrila (CH₃CN), identificou-se a interação entre as moléculas de forma unívoca.

A partir da técnica MS-TOF determinou-se os íons ejetados da superfície do filme, e a abundância dos fragmentos e agregados iônicos gerados pelo impacto dos elétrons de 2300 keV. A técnica TPD permitiu verificar a qualidade do filme, a quantidade das moléculas adsorvidas e a estrutura multi- e monocamada do filme. Verificou-se que a interação entre as moléculas, a qual resulta na formação de agregados de (CH₃CN)_n e (CD₃OD)_n acrescidos de átomos de hidrogênio da acetonitrila e deutério do metanol e radicais de ambas as moléculas, é fortemente dependente do processo de crescimento dos filmes condensados, da razão molar entre os compostos e da presença de água. O processo de cozimento alterou de forma significativa a produção de fragmentos e agregados.

Referências

- [1] D. J. Burke, W. Brown, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12**, 5947–5969 (2010).
- [2] Rabin R. J. Methikkalan *et al.*, *J. Phys. Chem. C* **121**, 2822–2835, (2017).
- [3] Ryutaro Souda, *The Journal of Physical Chemistry C* **120**, 934–943, (2016).

*E-mail: ddrocco@hotmail.com

Non-linear ion stopping calculations for a classical free-electron gas

P.L.Grande* and R. C. Fadanelli

*Ion Implantation Laboratory, Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul,
Av. Bento Gonçalves, 9500, CP 15051, CEP 91501-970, Porto Alegre, RS, Brazil*

The free-electron gas (FEG) model has been used to evaluate the electronic stopping because its simplicity and reliability [1]. It has been also used as a starting point and a reference for more advanced calculations to check convergence and predictions. The main physical ingredient in this model is the electron-ion interacting potential. It is well known in the framework of dielectric formalism or linearized Vlasov-Poisson equation for a classical plasma. For non-linear calculations the self-consistent electron-ion interacting potential is still unknown and therefore central potentials determined from the Friedel sum rule has been used [2] to calculate the electronic stopping power and the corresponding the Barkas effect [1] as a function of the projectile energy. In this work we solve the non-linear, self-consistent, classical equations for a FEG at $T=0$ interacting with a stationary ion to calculate the full non-central electron-ion potential, and thus the ion stopping power. We clearly show the origin of the Barkas effect, namely the first non-linear effect for projectiles at high velocities responsible. This effect is strongly enhanced by the multipolar part of the electron-ion potential, and we discuss the contribution from the non-conservation of the angular momentum in electron-ion collisions as proposed by Lindhard [3]. In addition, Bohr's stopping-power formula is rederived [4] for a free electron gas (FEG) system within the framework of nonrelativistic classical mechanics. A simple and more concise expression for the stopping power of charged particles in FEG is demonstrated on classical grounds. Using semiclassical arguments and the Euler-Maclaurin well-known mathematical formula,

Bloch's correction that links Bethe's quantum theory to Bohr's classical model is also recovered. These non-linear calculations are applied to understand the stopping of protons in different materials.

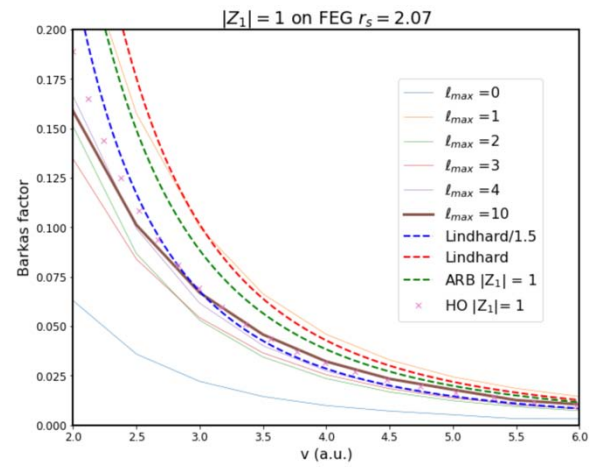


Fig. 1. Barkas factor for protons ($Z_1=1$) and antiprotons ($Z_1=-1$) on a FEG with Wigner-Seitz radius $r_s = 2.07$ and different multipolar expansions of the self-consistent ion-electron potential. Dashed lines correspond to standard models of the Barkas effect [1]. HO corresponds to Barkas calculations for a classical harmonic oscillator.

References

- [1] P. Sigmund, Particle Penetration and Radiation Effects, Vol. 1 (Springer Berlin Heidelberg New York, 2006)
- [2] N.R. Arista, Nuclear Instruments and Methods, **195**, (2002) **91-105**.
- [3] J. Lindhard, Nuclear Instruments and Methods, **132** (1976) **1-5**.
- [4] P.L. Grande, Phys. Rev. A **104**, (2021) **012807**.

* E-mail: grande@if.ufrgs.br

Vórtices en colisiones de ionización por impacto de iones pesados

T. A. Guarda^{†1}, R. O. Barrachina[†]

[†] *Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica, 8400 Bariloche, Río Negro, Argentina*

A lo largo los años los vórtices han sido comúnmente asociados a sistemas con una gran número de partículas. No obstante, resultan ser estructuras cuánticas casi omnipresentes en colisiones de pocos cuerpos, observándose no solo en ionizaciones por impacto de electrones, átomos [1, 2], y positrones [3] sino también en colisiones con iones [4]. A pesar de ello, los vórtices cuánticos producidos en procesos de colisiones atómicas por impacto de iones pesados es un campo que permanece mayormente inexplorado.

Es importante resaltar que el surgimiento de la técnica COLTRIMS en la década de 1990, no sólo abrió un abanico de nuevas posibilidades en el campo experimental, sino que representó un desafío para el campo teórico, donde era evidente la necesidad de ajustar los modelos disponibles para describir reacciones multicanales. Un claro ejemplo de esto es el reciente estudio de la sección eficaz completamente diferenciales para la ionización de He por impacto de protones a 75 KeV [5], donde se comparan los datos experimentales obtenidos con modelos teóricos de onda distorsionada, en los que se realizan aproximaciones de masa y simplificaciones de las interacciones internucleares, sin resultados favorables. En este contexto, procuramos reproducir los resultados utilizando una teoría cuántica que evita todo tipo de

aproximaciones cinemáticas. En particular, nos centramos en la configuración en la que el electrón es eyectado en la dirección hacia adelante y el proyectil es expulsado con diferentes ángulos, donde se observó un mínimo profundo en la sección eficaz completamente diferencial que había pasado desapercibido hasta el momento.

En este trabajo no solo mostraremos que este mínimo se debe a la presencia de un vórtice cuántico, sino que analizaremos su dependencia con distintos parámetros del sistema.

References

- [1] J. H. Macek, *J. Phys.: Conf. Ser.*, 212 (2010) 012008
- [2] S. Y. Ovchinnikov, J. H. Macek, L.Ph.H. Schmidt, y D. R. Schultz, *Phys. Rev. A* 83, 060701 (2011)
- [3] F. Navarrete, R. Della Picca, J. Fiol y R. O. Barrachina *at al J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 46 (2013) 115203
- [4] J. H. Macek, J. B. Sternberg, S. Y. Ovchinnikov, Teck-Ghee Lee, y D. R. Schultz, *Phys. Rev. Lett.* 102, 143201 (2009)
- [5] M. Dhital, S. Bastola, A. Silvus, J. Davis, B. R. Lamichhane, E. Ali, M. F. Ciappina, R. Lomsadze, A. Hasan, D. H. Madison, and M. Schulz, *Phys. Rev. A* 102, 032818 (2020)

¹E-mail: tamaraayelenguarda@gmail.com

Ionización por pulsos láser: el efecto de los potenciales de corto alcance en las estructuras holográficas.

J. A. Guzmán^{*} ¹, I. C. Ramos^{*} D. G. Arbó^{†‡} y S. D. López[†]

^{*} Departamento de Física, Fac. de Cs. Exactas, Univ. Nac. de Salta, Salta, Argentina.

[†] Instituto de Astronomía y Física del Espacio (Conicet-UBA), Buenos Aires, Argentina

[‡] Universidad de Buenos Aires, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Ciclo Básico Común, Buenos Aires, Argentina.

La ionización atómica provocada por láseres intensos de frecuencias del infrarojo es un proceso altamente no lineal que presenta diferentes estructuras de interferencia en los espectros de fotoemisión. Éstas pueden distinguirse entre interferencias temporales y espaciales.

En este trabajo, nos enfocaremos en las interferencias espaciales. Este tipo de interferencias requiere que los electrones revisiten al núcleo, recolisionando. Los electrones que al recolisionar tienen choques *duros* con el ion pueblan estructuras de energías altas. Por otra parte, los electrones que recolisionan de manera *suave*, no tienen posibilidad de intercambiar gran cantidad de energía y momento con el ion, y pueblan el espectro de energías bajas e intermedias. Como consecuencia, las trayectorias de estos electrones interfieren con los electrones directos dando lugar a las estructuras holográficas [1, 2].

Mediante el estudio de las estructuras holográficas se puede examinar la dinámica electrónica subciclo, siendo esto un hecho experimental [3] y bien explicado para el caso de potenciales Coulombianos [4]. En este trabajo mostraremos la influencia del apantallamiento del potenciales de Yukawa en las distribuciones de fotoelectrones.

En las Figuras. 1(a-c) se muestran los espectros fotoelectrónicos calculados mediante el modelo semiclásico de dos pasos (SCTS) [4] para la emisión desde un átomo con energía de ionización $I_P=0.5$ u.a. por un ciclo de un láser de frecuencia $\omega = 0.05$ u.a. e intensidad $F_0=0.075$ u.a. linealmente polarizado en la dirección z . Se observa que a medida que el apantallamiento se incrementa, las estructuras holográficas se apartan de la dirección

de polarización hacia momentos perpendiculares k_x mayores.

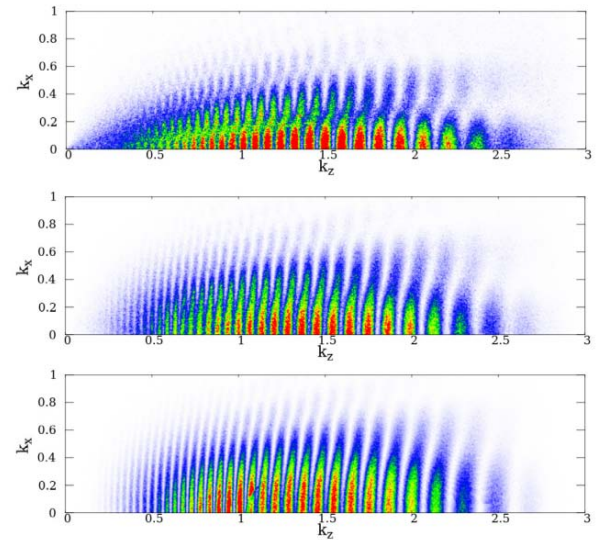


Fig. 1. Espectros fotoelectrónicos calculados mediante el modelo SCTS como función de los momentos paralelo k_z y perpendicular k_x a la polarización del campo eléctrico del pulso láser con frecuencia $\omega = 0.05$ u.a. e intensidad $F_0 = 0.075$ u.a.. (a) Caso Coulombiano (apantallamiento 0 u.a.) (b) apantallamiento 0.125 u.a. y (c) Yukawa con apantallamiento 0.25 u.a. .

References

- [1] S. Borbély, et al., Phys. Rev. A, **87**, 013405, (2013).
- [2] Y. Huismans, et al., Science, **331**, 61, (2011).
- [3] G. Porat, et al., Nature communications, **9**(1), 2805, (2018).
- [4] López, S. D.; Arbó, D. G. Phys. Rev. A; **100**, 023419 (2019).

¹E-mail: judithamiraguzman@gmail.com

Espectroscopía de emisión de rayos X K β de alta resolución para el estudio del entorno químico

S. Limandri^{1*}, G. Tirao¹

¹*Instituto de Física Enrique Gaviola, CONICET. Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Universidad Nacional de Córdoba. Medina Allende s/n Ciudad Universitaria, 5000. Córdoba, Argentina*

La caracterización del estado de oxidación y del entorno químico de los constituye un gran desafío, particularmente cuando se desarrollan nuevos materiales, en los cuales las propiedades eléctricas y magnéticas se hallan íntimamente relacionadas con la estructura electrónica local [1]. Las transiciones electrónicas que involucran orbitales moleculares e internos son candidatos para el estudio del entorno químico, ya que el carácter molecular de los orbitales depende fuertemente de las especies químicas involucradas.

La espectroscopía de emisión de rayos X de alta resolución (HR-XES) estudia las transiciones electrónicas desde orbitales moleculares hacia la capa K del elemento seleccionado a través del espectro de emisión de rayos X. Para elementos de transición 3d, el espectro HR-XES K β muestra una gran sensibilidad al entorno químico (Fig 1a). Para obtener información cuantitativa, los cambios espectrales deben determinarse mediante análisis rigurosos. Los cambios pueden medirse mediante diversos parámetros [2-3] y aplicando diversos métodos: a) *deconvolución spectral* b) determinación de *parámetros estadísticos* tales como los momentos de la distribución; c) aplicación de *métodos multivariados*, como análisis por componentes principales.

En este trabajo aplicamos estos métodos para determinar el estado de oxidación del Mn en diferentes compuestos. Las ventajas y desventajas, así como las incertezas asociadas a cada a cada método se presentan y discuten.

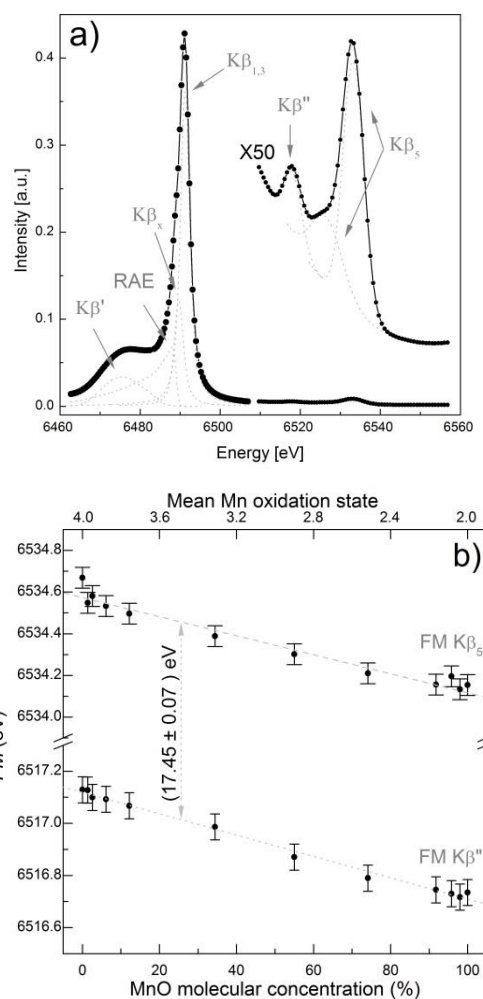


Fig. 1. a) XES K β spectrum of MnO₂. Experimental (dots); fit (lines). b) K β '' and K β ₅ first moments for mixtures of Mn²⁺ and Mn⁴⁺ oxides as a function of the MnO molecular concentration

Referencias

- [1] S. Vasala *et al.*, *Prog. Solid State Chem.* 43, (2015)
- [2] S. Limandri, *et al.*, *Chem. Phys.* 367, 93 (2010).
- [3] S. Limandri *et al.* *Spectrochimica Acta B* 144 29 (2018).

Bombardeio de Glicina e Fenilalanina por Partículas α (keV) Dependência da Seção de Choque de Destruição com Energia e Temperatura

I. Ulrichsen¹, R. Martinez^{1,2*}, E. F. da Silveira¹

¹ Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro - Brasil

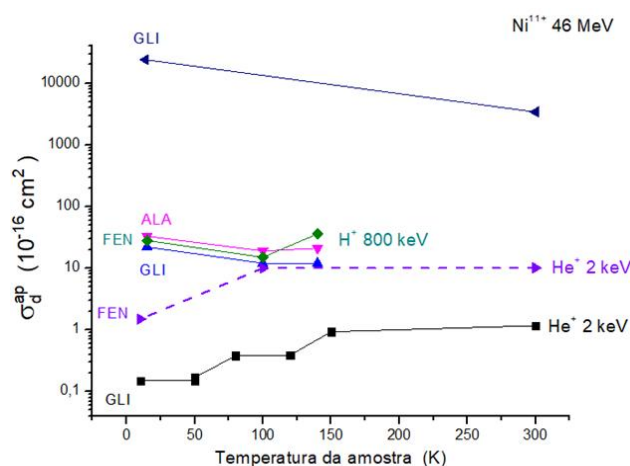
² Departamento de Física, Universidade Federal do Amapá – Brasil

Compostos orgânicos observados em corpos do espaço interplanetário são de particular importância para revelar processos físico-químicos nesses ambientes. Aminoácidos, como a glicina e a fenilalanina, devem ter desempenhado um papel crucial neste processo uma vez que são componentes básicos das proteínas. A análise de fragmentos do meteorito Murchison, por exemplo, sugere que sua composição é constituída de material produzido antes do início da vida terrestre atual. Em seu interior foram encontrados 17 aminoácidos primários e 13 açúcares. A irradiação por partículas energéticas é um dos fenômenos que ocasionam aqueles processos. Assim, informações sobre a radioresistência desses compostos são essenciais para o desenvolvimento de modelos sobre como as moléculas prebióticas são formadas e/ou como sobrevivem no espaço exterior.

Dado que as partículas α são um dos maiores constituintes do vento solar com fluência máxima em torno a 1 keV de energia, o presente trabalho tem como objetivo estudar a interação de íons de He^+ , com energias de 0,5, 1,0, 1,5 e 2,0 keV, com a glicina e a fenilalanina, moléculas orgânicas observadas em vários corpos do nosso sistema solar. Os efeitos induzidos por estes íons relativamente energéticos foram analisados pela técnica de espectroscopia por infravermelho (FTIR). Em particular o sputtering e a radiólise foram estudados como efeitos da radiação. Isto permitiu estimar a seção de choque de destruição por impacto de íons, e por sua vez a radiorresistência da

glicina, ou seja, sua meia-vida sob irradiação do He do vento solar.

Os experimentos foram realizados no Laboratório Van de Graaff da PUC-Rio, onde filmes de glicina e a fenilalanina foram preparados e irradiados com feixes de íons de He^+ de keV, produzidos por um pequeno canhão. Os resultados mostram que a seção de choque de destruição (σ_d) da glicina depende da energia do feixe e da temperatura da amostra. As seções de choque em função da temperatura foram obtidas e variam entre 10^{-15} e 10^{-18} cm^2 - temperaturas menores resultam em menores σ_d . Em função da energia, σ_d varia entre 10^{-15} e 10^{-16} cm^2 , sendo seus maiores valores correspondentes às maiores faixas de energia. Além disso, esta pesquisa pretende descobrir se moléculas-filhas surgem após a irradiação de glicina e a fenilalanina com partículas α de keV, sendo que as primeiras análises mostram a ausência de subprodutos devido à irradiação.



* E-mail: rafael.mr@unifap.br

Degradation of phenylalanine at room temperature by MeV ions

Christian Mejía^{1*}, Cíntia A. P. Da Costa^{2,3}, E. F. da Silveira²

¹*Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Cuenca, Cuenca, Ecuador,
email: cfmejiag@gmail.com*

²*Centre de Recherche sur les Ions, les Matériaux et la Photonique. Normandie Université, ENSICAEN,
UNICAEN, CEA, CNRS, CIMAP – 14000 Caen, France.*

³*Physics Department, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rua Marquês de São
Vicente 225, 22451-900, Rio de Janeiro, Brazil.*

Phenylalanine (Phe, C₉H₁₁NO₂) is an essential amino acid found in foods. It plays a vital role in the biological process of proteins and enzymes; hence, its radioresistance has been the object of investigation relevant to radiotherapy. This study set out to assess the radioresistance of Phe under irradiation of projectile ions H⁺, He⁺ and N⁺ from 0.5 to 2 MeV energies. Typical currents were from 6-150 nA for avoiding heating the sample [1]. The ion beams have been produced in the Van de Graaff Accelerator of PUC-Rio University, Rio de Janeiro.

Infrared spectroscopy (FTIR) was used to monitor the decreasing amount of Phe as a function of the dose absorbed in MGy. As can be seen from Fig. 1, five selected infrared bands from each of the six experiments, with different ion energies, reveal the mean apparent doses absorbed, $D_0^{ap} = 8.2$ MGy, necessary to dissociate or eject a Phe molecule at 300 K [2].

In addition, this study provides insight into the sputtering yield produced by irradiation using free software to estimate the contribution of the sputtering to the degradation of the sample.

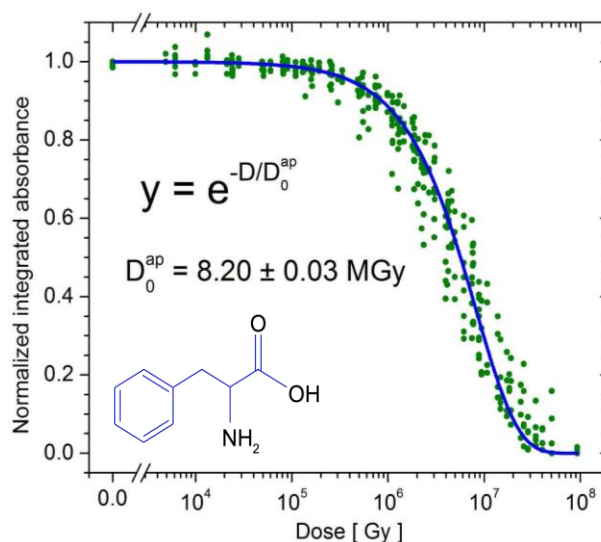


Fig. 1. Normalized integrated absorbances as dose function. Data of five bands from each of the six experiments using N⁺ 2 MeV, N⁺ 0.5 MeV, He⁺ 2 MeV, H⁺ 0.5 MeV, H⁺ 2 MeV, and H⁺ 2 MeV were fitted by exponential function (blue line).

References

- [1] da Costa, C. A. P., Souza-Corrêa, J. A., & da Silveira, E. F. (2021). Infrared analysis of Glycine dissociation by MeV ions and keV electrons. *MRAS*, 502(2), 2105-2119.
- [2] Mejía, C., da Costa, C. A., Iza, P., & da Silveira, E. F. (2022). Irradiation of Phenylalanine at 300 K by MeV Ions. *Astrobiology*, 22(4), 439-451.

* E-mail: cfmejiag@gmail.com

Irradiation effects induced in solid carbon oxide by swift heavy ions

C. Mejía^{*1}, H. Rothard², P. Boduch²

¹ Universidad de Cuenca, Facultad de Ciencias Químicas, Av. 12 de Abril y Loja, 010168, Cuenca, Ecuador

² Centre de Recherche sur les Ions, les Matériaux et la Photonique, Normandie Université, ENSICAEN, UNICAEN, CEA, CNRS, CIMAP, 14000 Caen, France

Pure carbon monoxide (CO) ices at 15 K were bombarded by swift heavy ions. The quantities of CO and its synthesized species C_mO_n were measured by mid-infrared spectroscopy, and their destruction (σ_d) and formation (σ_f) cross-sections, respectively, were determined. These cross-sections scale with the energy deposited by inelastic collision (S_e), $\sigma_{f,d} \propto S_e$. The sputtering yield of the sample was estimated and the quadratic dependence on S_e is confirmed, $Y_o \propto S_e^2$ [1]. In addition, the compaction of the sample was analyzed during the irradiation. The compaction cross cross section (σ_c) was found to be proportional to S_e (Fig. 1), similar to the compaction process observed in amorphous solid water [2]. These relations help understand the evolution of astrophysics ices containing CO in the outer solar system bodies, comets, the ices in the interstellar medium, and circumstellar envelopes continuously ex-

posed to energetic particles.

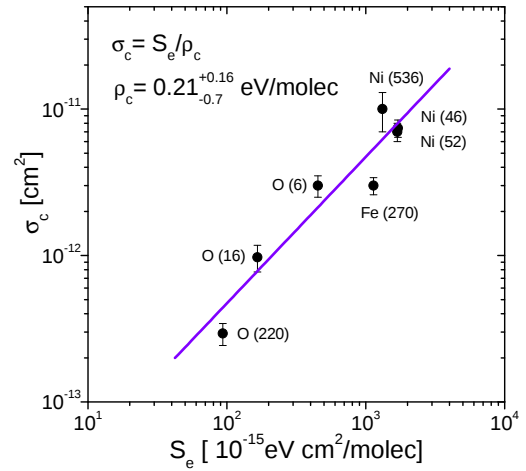


Fig. 1. Compaction cross section of amorphous CO ice as a function of the electronic stopping power. The fitting of data is shown by the blue line using $\sigma_c = S_e/D_0$, with $D_0 = 0.21$ eV/molec.

References

- [1] Duarte, E Seperuelo *et al. Astronomy & Astrophysics* 512, A71, (2010)
- [2] C. Mejía *et al. Icarus* 250, 222-229 (2015)

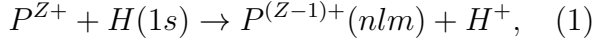
¹E-mail: ^{*} cfmejiag@gmail.com

Determinación de la entropía de Shannon en los procesos de captura electrónica de iones con átomos de hidrógeno

J. E. Miraglia*¹

* Instituto de Astronomía y Física del Espacio (Conicet-UBA), Buenos Aires, Argentina

Consideremos el proceso de captura,



y a partir del conocimiento de su sección eficaz σ_{nlm} nos proponemos calcular cual es el valor de la entropía de Shannon [1]. Vamos a considerar todo el proceso como si fuera una caja negra en la cual ingresa un proyectil P^{Z+} y sale las variables correspondientes al estado final, a saber, el número cuántico principal $n \in [1, \infty]$, el orbital $l \in [0, n-1]$, y el magnético $m \in [-l, l]$, como si fuesen las caras de un dado. La entropía de Shannon H se puede calcular en tres niveles

$$\begin{aligned} H_N &= - \sum_{n=1}^{\infty} S_n \ln S_n \\ H_{NL} &= - \sum_{nl} S_{nl} \ln S_{nl}, \quad y \\ H_{NLM} &= - \sum_{nlm} S_{nlm} \ln S_{nlm}, \end{aligned}$$

donde $S_n = \sigma_n/\sigma$, $S_{nl} = \sigma_{nl}/\sigma$, y $S_{nlm} = \sigma_{nlm}/\sigma$ son las "shape functions" y $\sigma = \sum_n \sigma_n = \sum_{nl} \sigma_{nl} = \sum_{nlm} \sigma_{nlm}$ es la sección eficaz total. Se usó los valores de σ_{nlm} calculadas con la aproximación Eikonal Impulsiva (EI) [1] y se lo comparó con el primer orden de Brinkman Kramers (BK).

El cero de la entropía de Shannon corresponde al caso de "no sorpresa", esto es el dado con una sola cara, donde vale $S_{nlm}^{\delta\delta\delta} = \delta_{n,n_0} \delta_{l,l_0} \delta_{m,m_0}$; o sea total certeza. Pueden probarse los siguientes límites

$$\begin{aligned} H_N^{\delta} &\rightarrow 0, \quad v \rightarrow 0 \text{ (resonant)}, \\ H_N^{\infty} &\rightarrow 0.678, \quad v \rightarrow \infty \text{ (Oppenheimer)}. \end{aligned}$$

También puede demostrarse que $H_{NL} \rightarrow 0$, y $H_{NLM} \rightarrow 0$, para $v \rightarrow 0$, sólo para protones ($Z = 1$). Se verifica en todos los casos que

$H_{NLM} \geq H_{NL} \geq H_N$, indicándonos que la "sorpresa" se incrementa con la habilitación de nuevos números cuánticos (o sea, nuevas caras, mas información).

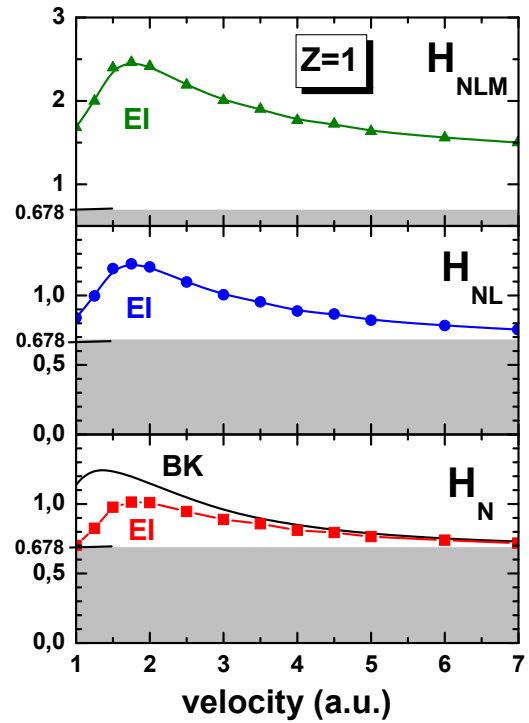


Fig. 1. Valores de H_N , H_{NL} y H_{NLM} para protones incidiendo sobre hidrógeno indicados en colores rojo, azul y verde, respectivamente, calculados con la EI, en negro la aproximación BK.

References

- [1] C.E. Shannon, Bell Syst. Tech. J. **27**, 379 (1949), and **27**, 623 (1948).
- [2] M.S. Gravielle and J.E. Miraglia, Phys. Rev. A **44**, 7299-7306 (1991).

¹E-mail: miraglia@iafe.uba.ar

Las secciones eficaces teóricas de captura e ionización, y experimentales de frenamiento satisfacen la ley de Benford

J. E. Miraglia^{1*}, M. S. Gravielle¹

¹ Instituto de Astronomía y Física del Espacio (UBA-CONICET), Buenos Aires, Argentina

La ley de Benford fue originariamente propuesta por el astrónomo Newcomb in 1881 y formulada más tarde en 1938 por Benford [1]. Para un conjunto de muchos datos (big data), ya sea provenientes de la naturaleza o producidos por el hombre, la distribución de Benford determina que la probabilidad de ocurrencia de la primer cifra significativa η sigue la siguiente ley

$$P_{\eta}^B = \log_{10}(1 + 1/\eta), \quad (1)$$

donde P_{η}^B es la probabilidad de Benford. El número η es un entero entre 1 y 9 (el cero no se considera como primera cifra significativa, pero si como segunda).

Encontramos que satisfacen la ley de Benford:

(a) El conjunto de secciones eficaces teóricas de captura de iones multicargados desde átomos de hidrógeno, al nivel dado por el número cuántico principal n , calculadas con la aproximación Eikonal Impulsiva (ver Fig. 1 (a)).

(b) El conjunto de secciones eficaces teóricas de captura de iones multicargados desde átomos de hidrógeno, al nivel dado por los números cuánticos principal n y orbital l , calculadas con la aproximación Eikonal Impulsiva (ver Fig. 1 (b)).

(c) El conjunto de secciones eficaces teóricas de ionización de hidrógeno, desde el estado dado por los números principal n y orbital l , por impacto de iones multicargados, calculadas con la aproximación Eikonal Impulse Continuum Distorted Wave (ver Fig. 1 (c)).

(d) Los valores experimentales de stopping-power de iones multicargados sobre átomos y moléculas, extraídas de la base de la International Atomic Energy Agency (ver Fig. 1 (d)).

Para más detalles ver referencias [2] y [3].

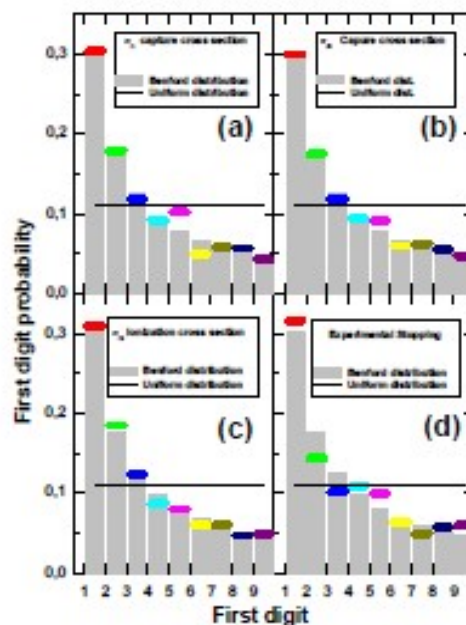


Fig. 1. Los símbolos en color son las probabilidades de ocurrencia del primer dígito. El histograma en gris representa la predicción de Benford (Eq. (1)).

Referencias

- [1] F. Benford, *Proc.Amer.Philos.Soc.***78**, 551-572 (1938).
- [2] J. E. Miraglia and M. S.Gravielle, <https://doi.org/10.48550/arXiv.2106.06099> (2021).
- [3] J. E. Miraglia and M. S. Gravielle, *Advances in Quantum Chemistry* **85** (2022), en prensa.

* E-mail: miraglia@iafe.uba.ar

Revisión de los últimos veinte años de stopping power de iones en la materia: presente y futuro de la base de datos de IAEA

Claudia C. Montanari¹*, Felipe Bivort Haiek¹, Paraskevi Dimitriou²

¹*Instituto de Astronomía y Física del Espacio, CONICET-UBA, Buenos Aires, Argentina*

²*Division of Physical and Chemical Sciences, International Atomic Energy Agency, Vienna, Austria*

El conocimiento de la pérdida de energía de iones en materiales (stopping power) es relevante para una amplia gama de aplicaciones que van desde las ciencias de materiales, las aplicaciones médicas, las tecnologías nucleares y las aplicaciones espaciales. Se utilizan directamente en técnicas experimentales como el análisis por haces de iones, rangos de deposición, implantación iónica, daño por radiación y rupturas de enlaces moleculares. También se necesitan valores confiables de stopping power en la producción de isótopos y el desarrollo de detectores para la investigación básica y aplicada. Por otro lado, la descripción teórica de la pérdida de energía ha sido un constante desafío desde los inicios de la física atómica dada la complejidad de procesos que involucran muchas colisiones y electrones [1].

En esta presentación brindamos una descripción general de los últimos veinte años de esfuerzo experimental y teórico, identificamos las tendencias en mediciones recientes [2-6] y discutimos las necesidades de nuevos datos. Nuestro análisis de datos experimentales se basa en la base de datos de la Agencia Internacional de Energía Atómica (IAEA) [7,8], y en descripciones semi-empíricas y teóricas seleccionadas.

También presentamos la modernización 2022 de la base de datos de stopping power del IAEA y las posibilidades que esta

brindará a las necesidades de una comunidad de usuarios en continua evolución.

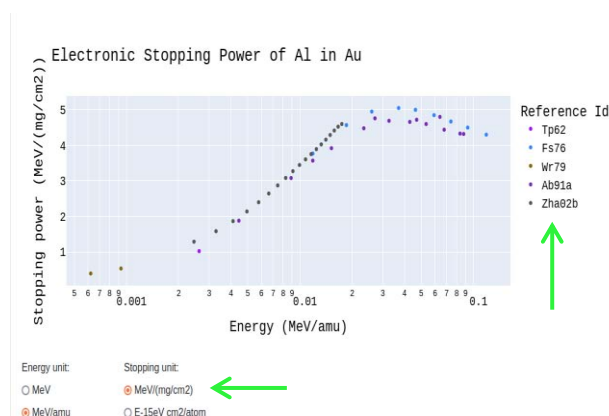


Fig. 1: Plot of experimental data in the new IAEA stopping database. Choose of data included and units.

Referencias

- [1] P. Sigmund, A. Schinner, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B 382, 15-25 (2016).
- [2] T. Materna et al, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B 505, 1-16 (2021).
- [3] P. Strom, D Primetzhofer, Phys. Rev. A 103, 022803 (2021).
- [4] S. Kumar et al, Vacuum 181, 109606 (2020).
- [5] M. Mery et al, Rad. E_ and Defects in Solids 176, 73-91 (2021)
- [6] M. V. Moro et al, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B 498, 1-8 (2021).
- [7] IAEA Stopping Database. Electronic Stopping Power of Matter for Ions: <https://www-nds.iaea.org/stopping/>
- [8] C. C. Montanari, P. Dimitriou, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B 408, 50 (2017)

* E-mail: mclaudia@iafe.uba.ar

O uso de redes neurais convolucionais para análise de espectros MEIS

V. G. Oliveira^{1*}, T. F. Silva¹, B. Konrad², F. Selau², H. Trombini², P. L. Grande²

¹ Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasil

² Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brasil

Redes neurais artificiais são algoritmos de inteligência artificial baseados em unidades computacionais que simulam operações do cérebro humano, esta ferramenta é capaz de aproximar funções desconhecidas a partir de um volumoso e complexo conjunto de dados. As redes têm demonstrado um grande potencial para realizar o processamento de dados na área de análise de materiais por feixes iônicos. De fato, o uso de algoritmos de machine learning permite analisar uma grande base de dados em menos tempo mantendo uma avaliação consistente sobre todo o conjunto quando comparada a uma análise manual. Assim, viabiliza que o processamento de muitas amostras sejam implementados na rotina de um laboratório.

A técnica MEIS, acrônimo em inglês para Espalhamento de Íons em Média Energia, permite a determinação do perfil em profundidade de filmes finos. O método gera um mapa 2D da quantidade de íons espalhados em função de sua energia e ângulo de espalhamento. Para analisar estes mapas é necessário comparar os dados experimentais com o modelo teórico, entretanto, esta é uma tarefa com alta demanda de tempo de um especialista e de difícil padronização. Então, neste trabalho realizamos o estudo da utilização de redes neurais convolucionais para realizar esta análise. Redes convolucionais são geralmente implementadas na área de visão computacional, mas são úteis neste problema pois os dados estão organizados em matrizes e não em vetores.

Como estudo de caso avaliamos o uso de redes neurais convolucionais para analisar amostras de filmes de platina depositados em

substratos de silício. Portanto, para ensinar a rede como realizar a análise de espectros MEIS, foi necessário gerar um conjunto de mapas simulados com parâmetros de amostra variados, que após ser pré-processado, o modelo é treinado e validado com esta base de dados. Uma vez que a rede foi treinada, ela é capaz de avaliar a espessura do filme, a quantidade de carbono presente e a energia do feixe de íons utilizado. Na figura 1 é possível observar os resultados obtidos pelo o modelo analisando amostras simuladas pelos softwares SIMNRA e PowerMEIS. Nesta figura também está presente a avaliação realizada pela rede de um espectro experimental medido pelo laboratório de feixes iônicos da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS) comparada à análise manual.

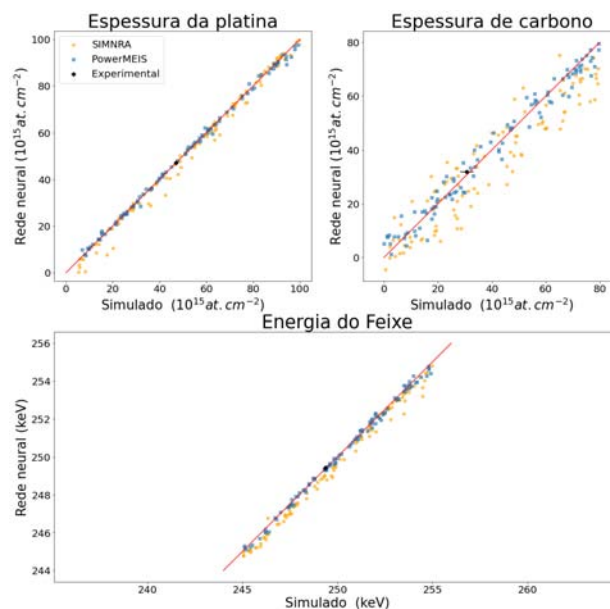


Fig. 1. Teste de validação da rede e análise do espectro experimental.

* E-mail: yinicius.oliv@usp.br

La Función Dieléctrica de Levine-Mermin para describir la pérdida de energía de blancos multieletrónicos

J. P. Peralta^{*1}, M. Fiori[†], A. M. P. Mendez^{*}, C. C. Montanari^{*}

^{*} Instituto de Astronomía y Física del Espacio (Conicet-UBA), Buenos Aires, Argentina

[†] Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de Salta, Salta, Argentina

La shellwise local plasma approximation (SLPA) se ha utilizado con éxito para tratar la pérdida de energía por unidad de camino (stopping power) debida a la excitación y la ionización de electrones ligados. Para blancos relativistas multieletrónicos (número atómico mayor que 54) en el rango de altas energías de impacto [1]. Nuevas medidas en Hf, Ta, W y Pt [2, 3, 4, 5] confirman estas diferencias.

En esta contribución, presentamos una mejora del formalismo de la SLPA mediante el uso de Levine-Mermin (SLPA-LM) [6]. Desde este enfoque consideramos una descripción más realista de los electrones ligados, considerando el amortiguamiento (damping) en las excitaciones colectivas. Introducimos un damping-local que depende de la densidad de electrones de cada capa, manteniendo todas las características teóricas de la SLPA. Utilizando una descripción no perturbativa para energías de impacto por debajo de la de excitación de plasmones [7]. Presentamos aquí nuestros resultados recientes de elementos del período VI (Hf, Ta, W, Os y Pt). La dependencia de la SLPA-LM con el número de subcapas, el stopping power en blancos metálicos del grupo VI de la tabla periódica (Cr y Mo). Como se observa en la Fig.1 para Pt, se obtiene una clara mejora en la región de alta energía, junto con una descripción precisa del máximo y también en la región de baja energía.

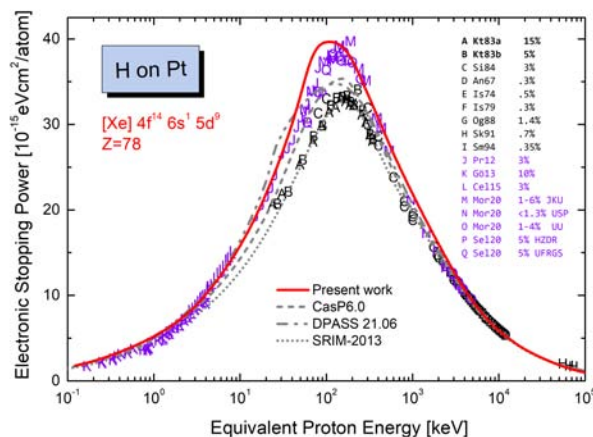


Fig. 1. Pérdida de energía. Curvas: línea sólida roja, resultados actuales; curva punteada gris, SRIM [10]; curva raya-doble punto gris, DPASS21.06 [8]; curva discontinua gris, CASP6.0 [9]. Símbolos: datos experimentales [11].

References

- [1] C. C. Montanari et al, Phys Rev. A 80, 01290 (2009).
- [2] C. C. Montanari, P. Miranda et al, Phys. Rev. A 101, 062701 (2020).
- [3] M. Moro et al, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B 498, 1 (2021).
- [4] M. Mery et al, Radiat. Eff. Defects Solids 177, 161 (2022).
- [5] F. F. Selau et al, Phys. Rev. A 102, 032812 (2020).
- [6] J. P. Peralta et al, Phys. Rev. A 105, 062814 (2022).
- [7] C. C. Montanari, J. E. Miraglia Phys. Rev. A 96, 012707 (2017).
- [8] P. Sigmund and A. Schinner, <https://www.sdu.dk/en/dpass>.
- [9] G. Schiwietz and P. L. Grande, <http://www.casp-program.org/>.
- [10] J.F. Ziegler <http://www.srim.org/>.
- [11] <https://www-nds.iaea.org/stopping/>.

¹E-mail: jpperalta@iafe.uba.ar

Poder de frenado, de La a Lu

J. P. Peralta^{*1}, A. M. P. Mendez^{*}, C. C. Montanari^{*}

^{*} Instituto de Astronomía y Física del Espacio (Conicet-UBA), Buenos Aires, Argentina

El conocimiento de pérdida de energía por unidad de camino (stopping power) electrónico es importante en muchos campos, desde la física básica a la tecnología y la medicina. Nos enfocamos en lantánidos debido a su complejidad electrónica (subcapa 4f abierta, necesidad de descripción relativista [1]); la importancia de los óxidos de tierras raras, y discrepancias entre los datos experimentales. En este trabajo realizamos un estudio sistemático del stopping power desde La ($Z=57$) hasta Lu ($Z=71$). Se desarrollan cálculos de estructura atómica completamente relativista, para las funciones de ondas atómicas y energías de ligadura. Estos valores son las únicas entradas de nuestros cálculos teóricos en el modelo de densidad local por capas (shellwise local plasma approximation o SLPA), [2]. Este modelo utiliza la función dieléctrica de Levine-Mermin (SLPA-LM), considera la densidad de electrones de cada capa y la energía de ionización [3]. Nuestros resultados cubren una amplia región energética considerando por separado el gas de electrones libres (FEG) y los electrones ligados como en [2].

Como ejemplo, en la Fig. 1 mostramos para stopping de protón en Gd, los resultados actuales describen muy bien el último dato experimental alrededor del stopping máximo. Las diferencias entre datos nuevos y valores anteriores muestran la necesidad de nuevas mediciones en todos los Lantánidos [4]. También comparamos con otros modelos teóricos, como [5] y CasP 6.0 [6]. Mostraremos que el estudio sistemático de todos los lantánidos nos deja algunas dudas sobre las predicciones del SRIM para este tipo de blancos.

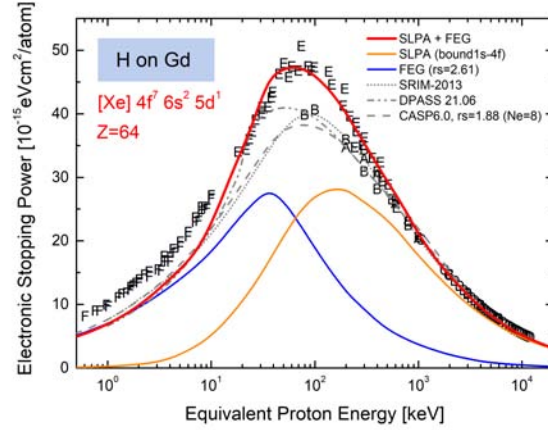


Fig. 1. Pérdida de energía. Curvas: sólida roja, presenta resultados usando SLPA-LM; sólida naranja para electrones ligados ($1s-4f$) y la línea sólida azul presenta resultados para FEG con $r_s = 2.61$ ($N_e = 3$); curva punteada gris, SRIM [7]; curva raya-doble punto gris, DPASS21.06 [5]; curva discontinua gris, CASP6.0 [6]. Símbolos: datos experimentales. Ver referencias de datos en [8]

References

- [1] A. M. P. Mendez et al, Nuclear Inst. and Meth in Phys. Res. B 460 (2019) 114–118.
- [2] C. C. Montanari et al, Phys. Rev. A 96. (2017) 012707.
- [3] J. P. Peralta, Phys. Rev. A 105, 062814 (2022).
- [4] D. Roth et al, Phys. Rev. Lett. 118 (2017) 103401.
- [5] P. Sigmund and A. Schinner, <https://www.sdu.dk/en/dpass>.
- [6] G. Schiwietz and P. L. Grande, <http://www.casp-program.org/>.
- [7] J.F. Ziegler <http://www.srim.org/>.
- [8] Electronic Stopping Power of Matter for ions, IAEA database, <https://www-nds.iaea.org/stopping/>.

¹E-mail: jpperalta@iafe.uba.ar

Estudio de Funciones Dieléctricas para Aluminio

J. P. Peralta^{*}1, M. Fiori[†],

^{*} *Instituto de Astronomía y Física del Espacio (Conicet-UBA), Buenos Aires, Argentina*

[†] *Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de Salta, Salta, Argentina*

Existen diversas aproximaciones para el cálculo de funciones dieléctricas en metales, una de las primeras es la función de Thomas Fermi, derivada a partir del potencial apantallado para una impureza cargada. En su versión original es un modelo estático, independiente de la frecuencia. Un modelo más refinado y muy popular derivado a partir de una teoría de respuesta lineal es el de Lindhard. A partir de la teoría de Lindhard se hicieron diversos modelos para incluir la interacción *electrón-electrón*. Uno de los primeros teóricos en incluir esta interacción fue John Hubbard que deriva una función dieléctrica en termino de la función de Lindhard y un factor que representa la interacción e-e. Con la misma forma funcional se hicieron otras funciones tales como la de Mermin o la de Swingwi-Sjolander [1].

$$\epsilon(q, \omega) = 1 - \frac{v \cdot P(q, \omega)}{1 + G_H(q, \omega)P(q, \omega)} \quad (1)$$

Donde $P(q, \omega)$ es la función de polarización de Lindhard y G_H es la función de Hubbard que puede tener distintas formas, siendo una corrección local al campo eléctrico y al apantallamiento dieléctrico.

La función dieléctrica de Mermin tiene la particularidad de que introduce explícitamente un tiempo entre colisiones de los electrones pertenecientes al gas. Este tiempo aparece como un parámetro fenomenológico que dependerá del metal en cuestión y en general es estimado a partir de resultados experimentales.

La función dieléctrica de Swingwi-Sjolander tiene la particularidad que incluye correlación de intercambio y fue calculada en forma numérica ya que las funciones de distribución de pares, la función de Hubbard y la función dieléctrica están relacionadas entre sí. Sin embargo, la función de Hubbard puede ser aproximada por una expresión simple:

$$G(q) = A(1 - e^{-B(q/k_F)^2}) \quad (2)$$

donde las constantes adimensionales A y B dependen del tipo de metal.

En este trabajo calcularemos la función dieléctrica para el aluminio, utilizando tres aproximaciones para la función de Hubbard más la aproximación de Swingwi-Sjolander, compararemos estos resultados entre sí y con los obtenidos a través de la función de Mermin. A partir de estas funciones calcularemos el poder de frenamiento para proyectiles iónicos, analizando nuestros resultados frente a los resultados experimentales con los que se cuenta hasta el momento [2].

También estimaremos el efecto de los estados internos ligados usando una aproximación basada en la primera aproximación de Born [3].

References

- [1] G. Mahan "Many particle physics" Plenum Press (1990).
- [2] B.C. Larson et al, Phys. Rev. Lett, 77, 1346 (1996).
- [3] A.S Davydov "Quantum Mechanics" Pergamon Press (1965).

¹E-mail: jpperalta@iafe.uba.ar

Técnicas de Análisis por Haces de Iones en el Acelerador de Iones Tándem 1,7 MV del Centro Atómico Bariloche

G. Anibal*, C. Olivares*, G. Ruano Sandoval†, L. Rodríguez†, P. D. Pérez†¹

* Centro Atómico Bariloche (CAB), S. C. de Bariloche, Argentina

† Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), CCT Patagonia Norte, S. C. de Bariloche, Argentina

El acelerador de iones Tándem 1,7 MV es un instrumento de grandes dimensiones localizado en el Departamento de Interacción de la Radiación con la Materia del Centro Atómico Bariloche (CAB). Dicho equipo es capaz de acelerar una gran variedad de iones, tanto desde gases como de sólidos, a distintas energías según se requiera, y dirigirlos hacia la línea de análisis de materiales o bien hacia la de colisiones atómicas con blancos gaseosos, dependiendo de la investigación que quiera llevarse a cabo.

Entre las técnicas de análisis de materiales por haces iónicos (IBA: *Ion Beam analysis*) empleadas regularmente en el laboratorio del acelerador se destacan PIXE (*Particle Induced X-ray Emission spectroscopy*), que permite obtener la composición atómica de la muestra y con la que se han realizado investigaciones tan diversas como el deterioro en materiales de implantes dentarios, secciones eficaces de producción de rayos x, composición química de nanopartículas y caracterización de piezas arqueológicas; RBS (*Rutherford Backscattering Spectroscopy*), con la que se explora la distribución en profundidad de los elementos constituyentes de la muestra y se ha empleado, por ejemplo, en la caracterización de películas de metales, óxidos y superconductores, análisis de la capa de conversión en detectores CMOS dedicados a la detección de neutrones y análisis de electrodos de baterías de nueva generación; y NRA (*Nuclear Reaction Analysis*), técnica también enfocada al estudio de la composición en función de la profundidad, con la que se han realizado capacitaciones y actividades de docencia pa-

ra alumnos de la Licenciatura en Física del Instituto Balseiro.

Por otro lado, está en proceso de diseño e implementación una nueva línea de análisis, con una cámara de ultra-alto vacío, apuntada al estudio de la Ciencia de Superficies y con espectroscopía de rayos x de alta resolución, en el contexto de desarrollo de proyectos PIP y PICT.

Actualmente se están llevando a cabo proyectos de investigación relacionados con la generación de neutrones monoenergéticos, intercalados moleculares, caracterización de films y nanopartículas y estudio de materiales de interés geológico. En esta presentación, describimos los avances de estos proyectos así como también las propuestas de trabajo en colaboración y/o para posgrado.

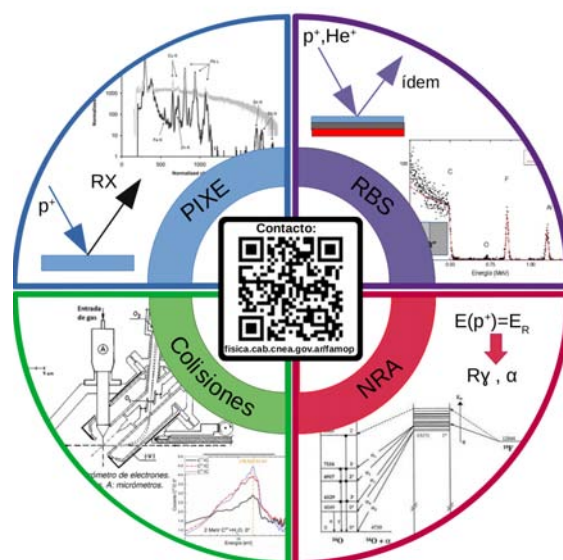


Fig. 1. En la figura se muestran las técnicas más utilizadas en el laboratorio.

¹E-mail: pablo.perez@cab.cnea.gov.ar

Formação e análise da estabilidade de íons duplamente carregados metaestáveis de moléculas aromáticas

Amir L. Perlin², Ricardo R. O. Junior², Wania Wolff¹

¹*Instituto de Física Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil*

²*Instituto de Química Física Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil*

O mecanismo de fragmentação dos Hidrocarbonetos Aromáticos (HAs) sob radiação ionizante ainda não é totalmente elucidado. A proposta do trabalho experimental e teórica foi de investigar a ionização deste grupo de moléculas com ênfase na formação de íons duplamente carregados e de fragmentos iônicos por impacto de elétrons. O foco da investigação foi o estudo da formação de íons duplamente carregados metaestáveis de moléculas aromáticas contendo no anel seis átomos de carbono. A presença destas espécies pode ser identificada univocamente no espectro de massa pela sequência de picos que incluem valores fracionários de razão massa/carga [1]. As moléculas selecionadas foram: benzeno (C_6H_6), tolueno ($C_6H_5CH_3$), clorobenzeno (C_6H_5Cl), anisol ($C_6H_5OCH_3$) e anilina ($C_6H_5NH_2$). A escolha de compostos benzênicos de grupos substituintes ativadores e desativadores visou determinar a influência do radical na formação de análogos de dications do benzeno. Por questões comparativas, o cicloexano (C_6H_{12}), um composto não aromático, também foi considerado.

As medidas foram realizadas no Physikalisch-Technisch Bundesanstalt no laboratório da divisão de radiação ionizante [1]. Utilizou-se um espectrômetro de massa por tempo de voo de alta resolução temporal, um mini-reflectron. A partir da análise dos espectros, determinou-se a abundância dos dications das moléculas em relação a molécula-mãe ionizada em função da energia de impacto dos elétrons em uma larga faixa de energia, de 20 até 2000 eV. As abundâncias de produção dos dications $C_6H_n^{2+}$ da molécula de benzeno e clorobenzeno foram comparadas com as abundâncias de fragmentos iônicos na mesma região de massa/carga (m/z).

Utilizando métodos de química teórica, determinou-se as possíveis estruturas de menor energia dos

dications $C_6H_n^{2+}$. Cálculos de busca sistemática do mínimo global utilizando o método de algoritmo genético implementado no programa AUTOMATON [2] foram realizados. Como o programa foi recentemente desenvolvido, foi necessário primeiramente validar o mesmo, empregando a molécula $C_6H_6^{2+}$ como padrão porque suas estruturas moleculares já foram estudadas anteriormente [3]. Após a definição dos parâmetros iniciais, determinou-se as possíveis estruturas das espécies $C_6H_5^{2+}$, $C_6H_4^{2+}$ e $C_6H_3^{2+}$. Cálculos de otimização de geometria e frequências dos isômeros de mais baixa energia foram realizados com o funcional PBE0 na base def2-TZVPP e resultados mais precisos foram obtidos. Esses resultados mostraram que apenas o $C_6H_3^{2+}$ apresentou uma estrutura de menor energia totalmente linear. Desta forma, há indícios que a separação entre as duas cargas não seja o fator de maior influência na formação como sugerido em trabalhos anteriores.

Referências

- [1] Wolff W., Perlin A., Oliveira R. R., Fantuzzi F., Coutinho L. H., Ribeiro F. A., Hilgers G., J. Phys. Chem. A, 124, 9261, 2020.
- [2] Osvaldo Yañez, Rodrigo Báez-Grez, Diego Inostroza, Walter A. Rabanal-León, Ricardo Pino-Rios, Jorge Garza, And W. Tiznado, Journal of Chemical Theory and Computation, 15(2), 1463-1475, 2019.
- [3] Anand, S.; Schlegel, H. B. Dissociation of benzene dication $[C_6H_6]^{2+}$: exploring the potential energy surface. J. Phys. Chem. A 2005, 109, 11551–11559.

* E-mail: a.mir.l@hotmail.com

Radiólise de bases nitrogenadas de DNA irradiadas por elétrons de keV à diferentes temperaturas

V. P. Rego^{*1}, E.F. da Silveira¹ e C. A. P. da Costa¹

¹Departamento de Física PUC-Rio, Rio de Janeiro, Brasil

A origem da vida ainda é uma questão aberta na ciência. Dentre as possíveis respostas, a panspermia é uma alternativa amplamente discutida. Ao investigar esta possibilidade, o desenvolvimento de modelos que descrevam o comportamento de moléculas interagindo com raios cósmicos são de extrema importância. Para esta finalidade, filmes finos de diferentes espessuras de bases nitrogenadas - adenina, citosina, guanina e timina - foram depositados sobre pastilhas de ZnSe para serem irradiados por elétrons de 1,0 e 0,50 keV. A adenina foi irradiada sob diferentes temperaturas. Após cada irradiação parcial, a espectroscopia óptica na região do infravermelho (FTIR) foi usada para monitorar as modificações nas características espectrais.

Observou-se que a seção de choque de destruição das bases nitrogenadas irradiadas é $\sim 10^{-16} \text{ cm}^2$ e, para a adenina, este valor aumenta para temperaturas baixas. A seção de choque varia muito pouco quando as espessuras dos filmes são aumentadas de 10 para 30 nm, e os valores encontrados para as quatro bases seguem a ordem: citosina, adenina, guanina e timina, respectivamente, da menos para a mais radioresistente.

O programa de microscopia eletrônica CASINO gera dados importantes tais como a catodoluminescência em função da profundidade do feixe no interior de uma amostra. Pode-se relacionar, na figura 1, a catodoluminescência com a energia depositada no interior do alvo. Visto que a seção de choque (σ_0) é dependente da energia para a dissociação molecular (onde

f é a parte da energia depositada útil para a radiólise e E_{dep} é a energia depositada),

$$\sigma_0 = (f E_{\text{dep}}/D_0) / N_{\text{max}}$$

pode-se obter diferentes seções de choque no interior de uma amostra. E a seção de choque se torna uma somatória de exponenciais.

A obtenção dos resultados de evolução de densidade colunar em função da fluência como a somatória de exponenciais já citada recebe o nome de CASINO-estendido [1] e tais dados apresentam bom acordo com dados experimentalmente obtidos quando radiólise e sputtering são considerados.

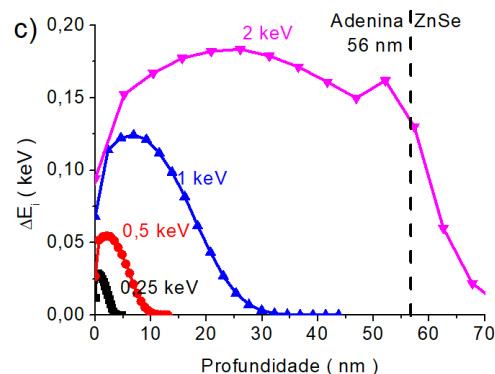


Fig. 1. Dependência da energia depositada pela profundidade em uma amostra de adenina obtida pelo programa CASINO.

Agradecimentos: CNPq, FAPERJ e CAPES.

Referências

- [1] C. A. P. da Costa *et al*, Mon. Not. R. Astron. Soc. **511**, 4031–4043 (2022)

* E-mail: viniciuspessanha1@gmail.com

Modelo de potencial separable aplicado a ionización de Hidrógeno por campo intenso

V. D. Rodríguez^{*,† 1}

^{*} Universidad de Buenos Aires, FCEyN, Departamento de Física. Buenos Aires. Argentina.

[†] CONICET-Universidad de Buenos Aires, Instituto de Física (IFIBA). Buenos Aires, Argentina.

Un modelo de potencial separable para el estudio de ionización atómica por pulsos de láser se ha sido introducido recientemente [1]. El potencial local del átomo blanco es reemplazado por un modelo de potencial separable no local que admite algunos estados ligados del potencial original. Se han empleado solamente tres estados obteniéndose probabilidades de excitación y espectros de ionización. El método ha sido probado por otros autores [2] sugiriendo aumentar el conjunto de estados ligados soportado por el potencial modelo.

En este trabajo se obtienen resultados con potenciales separables y número cuántico principal máximo n_{max} que va de 2 a 5. El número máximo de estados admitidos es 15 ($n_{max} = 5$). Se utilizan los mismos parámetros que en la figura 3 de [1], aunque el pulso láser se ha reducido a 20 ciclos (la mitad). De esta manera el átomo no está completamente ionizado. al final del pulso, y la probabilidad de ionización puede utilizarse para probar las propiedades de convergencia del modelo. En la Tabla 1, las probabilidades de ionización total en el final del pulso se enumeran para diferentes valores de n_{max} en el modelo de potencial separable. Cuando se usa sólo tres estados (1s, 2s y 2p₀) se observa una clara sobreestimación de la probabilidad de ionización. Sin embargo, las probabilidades de ionización con n_{max} 4 y 5 difieren entre sí en menos del 5 por ciento.

Tabla 1. Probabilidades de ionización.

n_{max}	estados	Prob. de ionización
2	3	0.91
3	6	0.72
4	10	0.67
5	15	0.64

La Figura 1 muestra las probabilidades de excitación para los estados más poblados, (a)

1s, (b) 2p₀ y (c) 3p₀ en función del tiempo para diferentes valores de n_{max} . Todos los casos de n_{max} concuerdan bien hasta 4 ciclos. Más allá de este tiempo, las probabilidades de 1s y 2p₀ para $n_{max} = 2$ se apartan de los casos con n_{max} más altos, que muestran una convergencia global. La comparación entre n_{max} 4 y 5 es bastante buena incluso al final del pulso. Se concluye que el método exhibe buenas propiedades de convergencia si al menos los primeros seis estados están representados por el modelo de potencial separable.

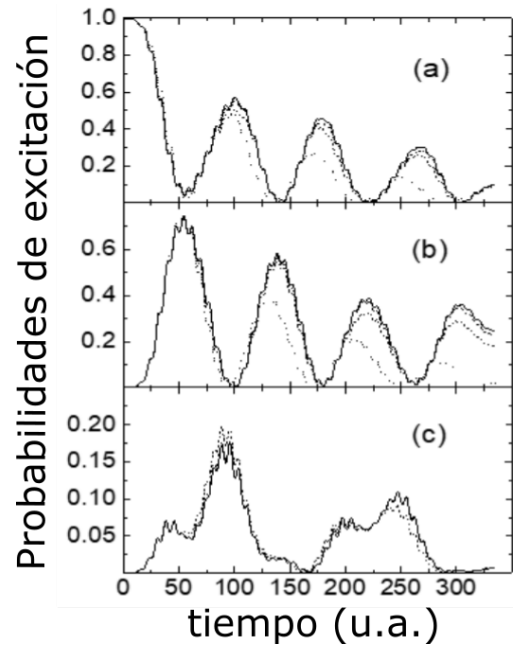


Fig. 1. Probabilidades de estar en (a) 1s, (b) 2p₀, (c) 3p₀ para n_{max} 2 (líneas punteadas); 3 (líneas discontinuas) y 5 (líneas llenas).

References

- [1] H. M. Tetchou Nganso et al. Phys. Rev. A. 87 013420 (2013)
- [2] A. N. Grum-Grzhimailo et al. Phys. Rev. A. 88 055401 (2013)

¹E-mail: vladimir@df.uba.ar

Carga dinámica efectiva en el continuo del modelo CDW-EIS para ionización simple en colisiones ión-átomo: dependencia angular y energética.

M.F. Rojas¹, M.A. Quinto^{2*}, R.D. Rivarola^{2*}, J.M. Monti^{2*}

^{1,2} Instituto de Física Rosario (CONICET-UNR) and Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura, Universidad Nacional de Rosario, Avenida Pellegrini 250, 2000 Rosario, Argentina

El modelo de onda distorsionada CDW-EIS (Continuum Distorted Wave-Eikonal Initial State) se aplicó con éxito para obtener las secciones eficaces de ionización simple en numerosos sistemas de colisión [1]. Sin embargo se observa una subestimación sistemática de los experimentos para grandes ángulos de emisión, cuyo origen yace en la aproximación del potencial no coulombiano del blanco residual por un potencial coulombiano efectivo con una carga dada por el criterio de Belkić [2]. En un trabajo previo se ha mostrado que la subestimación a grandes ángulos disminuye notablemente al reemplazar la carga de Belkić por la carga nuclear del blanco [3].

de 200 eV como función del ángulo de emisión. Teoría: línea roja DC-CDW-EIS, línea de guiones negra CDW-EIS y línea guión-punto azul CDW-EIS calculado con funciones numéricas. Experimentos: puntos negros [4].

De esta manera a fin de disminuir o eliminar tales subestimaciones se propone considerar un potencial coulombiano efectivo con una carga dinámica dependiendo del ángulo y energía de emisión. Este modelo ha mostrado una mejora en las secciones eficaces doble diferenciales principalmente para ángulos de emisión hacia atrás en todo el rango de energías de emisión.

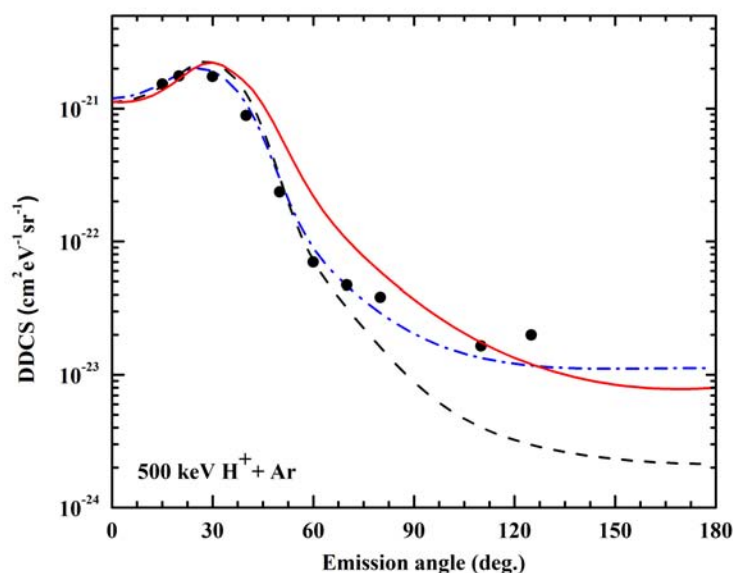


Fig. 1. Sección eficaz doble diferencial para ionización simple de Ar por impacto de H^+ a 500KeV, a una energía de emisión electrónica

E-mail: rojas@ifir-conicet.gov.ar

Referencias

- [1] Stolterfoht N, DuBois R and Rivarola R D Electron Emission in Heavy Ion-Atom Collisions, (Berlin: Springer-Verlag, 1997).
- [2] Belkić DŽ, Gayet R and Salin A, Phys. Rep. **56**, 279 (1979).
- [3] Monti J M, Fojón O A, Hanssen J and Rivarola R D, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **43**, 205203 (2010).
- [4] M. E. Rudd, L. H. Toburen, and N. Stolterfoht. Differential Cross Sections for Ejection of Electrons from Argon by Protons. Atomic Data and Nuclear Data Tables, **23**: 405, January 1979.

Ionización de moléculas por impacto de iones desnudos: carga dinámica efectiva en el continuo del blanco.

M.F. Rojas¹, M.A. Quinto^{2*}, N.J. Esponda^{2*}, R.D. Rivarola^{2*}, J.M. Monti^{2}**

^{1,2} Instituto de Física Rosario (CONICET-UNR) and Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura, Universidad Nacional de Rosario, Avenida Pellegrini 250, 2000 Rosario, Argentina

El modelo de onda distorsionada CDW-EIS (Continuum Distorted Wave-Eikonal Initial State) para la determinación de secciones eficaces doble diferenciales de ionización simple de blancos moleculares, ha mostrado buenos resultados cualitativos [1,2]. Sin embargo se presenta una subestimación de los experimentos para grandes ángulos de emisión y altas energías. Con el fin de disminuir estas subestimaciones se ha considerado reemplazar el potencial no coulombiano del estado final del continuo, por un potencial coulombiano efectivo con una carga dinámica dependiente del ángulo y la energía de emisión, dada por el criterio de Belkić.

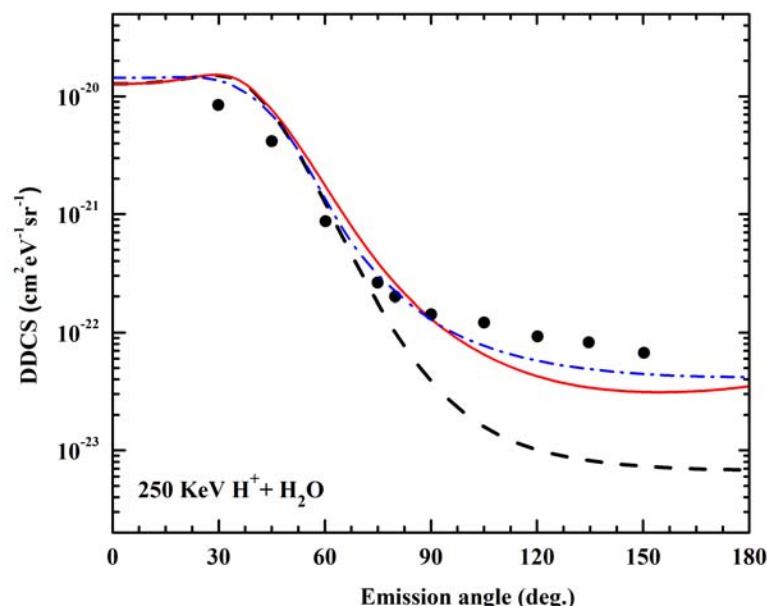


Fig. 1. Sección eficaz doble diferencial para ionización simple de H₂O por impacto de H⁺ a 250 KeV, a una energía de emisión electrónica de 320 eV

* E-mail: rojas@ifir-conicet.gov.ar

como función del ángulo de emisión. Teoría: línea roja DC-CDW-EIS, línea de guiones negra CDW-EIS y línea guión-punto azul CDW-EIS calculado con funciones numéricas. Experimentos: puntos negros [3].

Esta propuesta ha mostrado una mejora notable en los resultados de las secciones eficaces doble diferenciales en todo el rango de energías de emisión, particularmente para ángulos de emisión hacia atrás.

Referencias

- [1] C. Tachino, J. Monti, O. Fojón, C. Champion, and R. Rivarola, Ionization of water molecules by ion beams. On the relevance of dynamic screening and the influence of the description of the initial state, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **47**, 035203 (2014).
- [2] Anuvab Mandal, Chandan Bagdia, Madhusree Roy Chowdhury, Shamik Bhattacharjee, Deepankar Misra, Juan M. Monti, Roberto D. Rivarola, and Lokesh C. Tribedi. Electron emission from CH₄ molecules in collisions with fast bare ions. *Phys. Rev. A*, **101**, 062708 (2020).
- [3] Abhijeet Bhogale, S. Bhattacharjee, M. Roy Chowdhury, Chandan Bagdia, M. F. Rojas, J. M. Monti, A. Jorge, M. Horbatsch, T. Kirchner, R. D. Rivarola, and L. C. Tribedi. Electron emission from water vapor under the impact of 250-keV protons. *Phys. Rev. A*, **105**, 062822 (2022).

Nanopartículas de Ag embebidas modificadas por feixe de Ne^+

B. Konrad¹, F. F. Selau^{1,*}, H. Trombini^{1,2}, P. F. P. Fichtner¹, P. L. Grande¹

¹Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), Porto Alegre, Brasil

²Universidade Federal de Ciências da Saúde de Porto Alegre (UFCSPA), Porto Alegre, Brasil

Nanopartículas (NPs) de prata na superfície ou embebidas em filmes finos dielétricos apresentam propriedades interessantes para tecnologias de biossensores, energia, informação e telecomunicações. O comportamento de tais matrizes de NPs depende do tamanho, forma e distribuição das NPs.

Este trabalho explora os efeitos das irradiações de Ne^+ nas características do arranjo de NPs de prata embebidas em Si_3N_4 produzidas via *magnetron sputtering* [1]. Realizamos irradiações de Ne^+ com 200 keV e incidência de 60° em relação à normal da amostra. Esta irradiação foi realizada em temperatura ambiente dentro de um sistema de espalhamento de íons de média energia (MEIS). Um feixe de He^+ de 200 keV foi usado para caracterizar a microestrutura antes e depois das irradiações. A Fig. 1 mostra um esquema da coleta de dados e um típico espectro (mapa 2D) obtido pela técnica MEIS sobre as NPs de Ag.

As medidas MEIS correspondentes demonstram que, após uma fluência de irradiação de $\Phi \approx 4 \times 10^{15} \text{ Ne/cm}^2$, as NPs inicialmente oblatas (valores médios do semi-eixo $R = 4,1 \text{ nm}$ e $r = 3,69 \text{ nm}$) seguem um processo de engrossamento e evoluem para estruturas contendo um núcleo (n) de Ag e uma região enriquecida por átomos de Ag (c) apresentando dimensões médias $R_n = 7,96 \text{ nm}$, $r_c = 4,25 \text{ nm}$ e $R_c = 12,74 \text{ nm}$, $r_n = 9,2 \text{ nm}$. As evoluções microestruturais observadas por este experimento de irradiação são discutidas em função da geometria de irradiação e comportamentos de deslocamento atômico dos átomos de Ag, Si e N. A quantificação dos dados obtidos por MEIS revela um coeficiente de difusão induzido por irradiação para Ag em

Si_3N_4 de $D_{RED} \approx 7,4 \times 10^{-22} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ e um coeficiente de decomposição para NPs de $Y = 4,85 \text{ Ag}_{\text{atoms}} \text{ Ne}_{\text{ions}}^{-1}$.

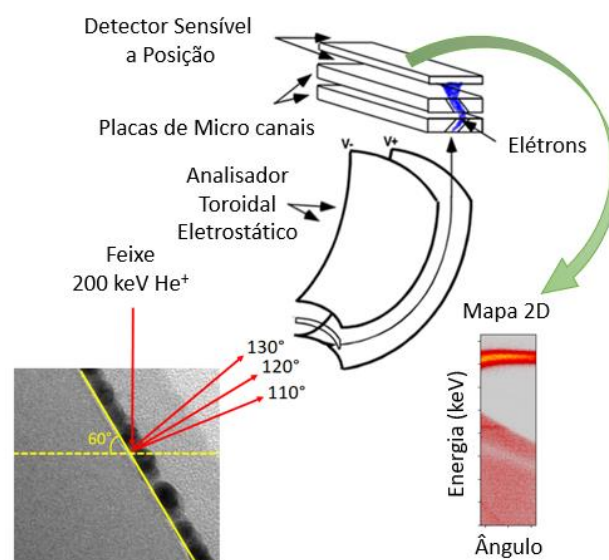


Fig. 1. Esquema da aquisição de dados pela técnica MEIS. Na parte inferior esquerda está uma imagem de microscopia eletrônica de transmissão das NPs de Ag e à direita um espectro típico obtido pela técnica MEIS.

Agradecimentos

Pelo suporte financeiro da parte do Instituto Nacional de Engenharia de Superfícies (INES), da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq). Pela infraestrutura disponibilizada pelo Laboratório de Implantação Iônica, Centro de Microscopia e Microanálise e Laboratório de Conformação Nanométrica da UFRGS.

Referências

- [1] B. Konrad, *et al.* *Journal of Materials Science* **56.13** (2021).

* E-mail: ffselau@gmail.com

Secciones eficaces de procesos inelásticos por impacto de protones sobre bases del ADN y ARN. Aplicación al cálculo de Stopping Power

C. Strubbia^{1,2*}, V. Tessaro^{1,2,3}, M. E. Galassi^{1,2}

¹ Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura - UNR, Rosario, Argentina

² Grupo de Física Biomédica - IFIR (CONICET - UNR), Rosario, Argentina

³ Institute de Physique Nucléaire de Lyon, Université Lyon 1, Villeurbanne, Francia

La Protonterapia (radioterapia en la que se utilizan haces de protones) es actualmente una de las terapias de vanguardia para el tratamiento de algunos tipos de tumores del sistema nervioso central, oculares y pediátricos, ya que permite un mejor control tumoral que la radioterapia convencional. Esta técnica permite una importante localización de la dosis en el tumor gracias a las propiedades físicas de la interacción de los protones con la materia. Sin embargo, la dosimetría para estos haces es muy compleja, ya que requiere conocer la Eficacia Biológica Relativa (EBR). Este parámetro depende de varios factores, tales como: la energía y carga del ion incidente, la microdosimetría, entre otros. Para abordar su estudio, resulta relevante disponer de las secciones eficaces de los procesos físicos inelásticos que toman lugar cuando los protones impactan sobre las bases de ADN y ARN. Por este motivo, en el presente trabajo se aborda el cálculo de las secciones eficaces de ionización, excitación electrónica e intercambio de carga por impacto de protones sobre adenina, timina, citosina, guanina y uracilo aplicando modelos semiempíricos [1][2], a los que se realizaron ajustes de acuerdo a los blancos moleculares estudiados. Los resultados obtenidos muestran muy buen acuerdo con datos experimentales y con resultados obtenidos aplicando otros modelos teóricos ab-initio (fig. 1).

El Stopping Power electrónico (pérdida de energía del proyectil por unidad de camino recorrido en el medio), calculado a partir de estas secciones eficaces, presenta muy buen acuerdo con otros modelos teóricos. Los resultados obtenidos se comparan a su vez con los obtenidos para agua líquida y vapor, mostrando diferencias notables. Esta

información debería considerarse en códigos de simulación para el cálculo de la EBR en Protonterapia.

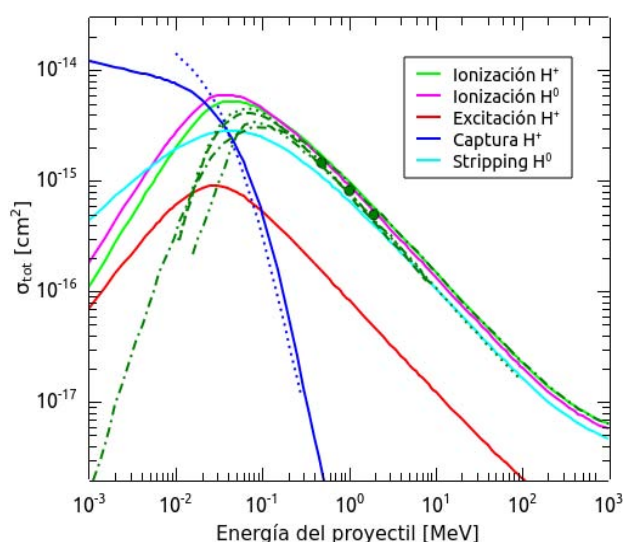


Fig. 1. Secciones eficaces por impacto de protones sobre Adenina. Se muestran resultados de otros modelos: (---) [2], (...) [3], (- -) [4] y (-.-) [5] y datos experimentales: círculos [6]. La línea llena corresponde a nuestros cálculos.

Referencias

- [1] M. Dingfelder *et al*, *Rad. Phys. Chem.* **59**, 255-275 (2000).
- [2] Z. Francis *et al*, *Jour. Appl. Phys.* **122**, 014701 (2017).
- [3] M. E. Alcocer-Ávila *et al*, *Sci. Rep.* **9**:14030 (2019).
- [4] M. E. Galassi *et al*, *Phys. Med. Biol.* **57**, 2081-2099 (2012).
- [5] P. de Vera *et al*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23**, 5079 (2021).
- [6] Y. Iriki *et al*, *Phys. Rev. A* **84**, 052719 (2011).

* E-mail: camilastrubbia@outlook.com

Fotoionización asistida por campos no homogéneos

R. Della Picca^{*1}, S. López[†], M. Ciappina[‡], J. M. Randazzo^{*}, D. Arbó^{†◇}

^{*} Centro Atómico Bariloche - CONICET and IB - U.N. Cuyo, Bariloche, Argentina

[†] Instituto de Astronomía y Física del Espacio (Conicet-UBA), Buenos Aires, Argentina

[‡] Physics Program, Guangdong Technion - Israel Institute of Technology, Guangdong, China

[◇] Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Ciclo Básico Común, Universidad de Buenos Aires, Buenos Aires, Argentina

La fotoionización asistida por láser (LAPE, por sus siglas en inglés) ocurre cuando un campo ultravioleta extremo (XUV) y un infrarrojo (IR) se superponen en el tiempo y en el espacio donde se encuentra el átomo. Dependiendo de la duración del XUV se pueden distinguir distintos regímenes de ionización: (i) "sideband", cuando la duración del XUV es de varios ciclos del IR. En este caso la absorción simultánea de un fotón XUV y el intercambio de varios fotones IR se manifiesta con "bandas", o picos en el espectro electrónico cada vez que se satisface la regla de conservación de energía [ver figura 1(a)]. Por otra lado, (ii) en el régimen de "streaking", el XUV es mucho más corto que la longitud de onda del láser por lo que el electrón se comporta como una partícula clásica y al instante de la ionización toma momento lineal del campo IR. Estas características de los espectros de emisión en función de los perfiles TEMPORALES de los campos ya han sido estudiadas ampliamente y comprendidas a través de expresiones analíticas (deducibles por la periodicidad del láser IR) que dependen de los parámetros de los perfiles temporales de los campos en cada uno de los regímenes, y de cierta cantidad "kernel", con información del átomo y de ciertos arreglos geométricos que es idéntica para todos los regímenes [1].

Si bien la dependencia del perfil temporal ha sido analizada con profundidad, aún resta comprender cómo afecta el perfil ESPACIAL del campo en la emisión electrónica. Por esta razón, en el presente trabajo consideramos el campo IR láser espacialmente NO homogéneo y estudiamos la distribución de momentos resuelta en ángulos y energía para la

fotoionización de He(1s). Para ello utilizaremos la aproximación de campo fuerte (SFA) NO dipolar, donde incorporamos la función de onda Volkov No dipolar, que describe al electrón emitido en presencia de un campo láser no homogéneo en el espacio [2].

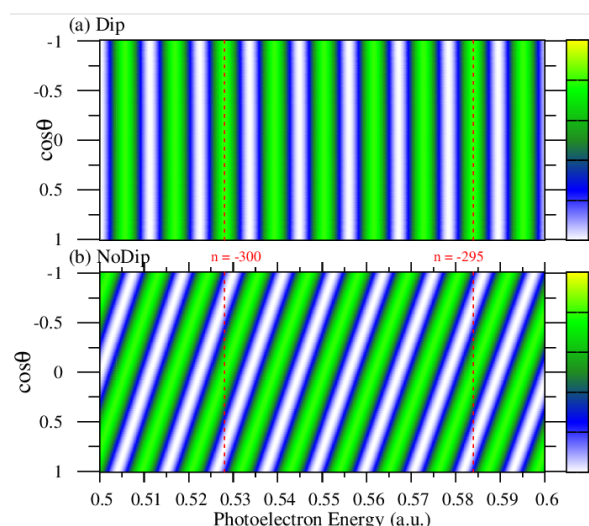


Fig. 1. Factor interciclo en (a) la aproximación dipolar y (b) el caso NO dipolar.

Uno de los principales efectos que introduce la no homogeneidad del IR es la inclinación de las "bandas" del factor interciclo (quien modula la emisión electrónica) según la dirección de emisión, ver figura. Y más aún, tal como mostraremos durante la conferencia, esta inclinación se asienta a energías altas del fotoelectrón.

References

- [1] R. Della Picca *et al* *Phys. Rev. A* 102, 043106 (2020).
- [2] C. J. Joachain *et al*, *Atoms in Intense Laser Fields*, Cambridge University Press (2012).

¹E-mail: renata@cab.cnea.gov.ar

Intercambio de carga en colisiones de Li^+ dispersados por una superficie de grafeno en presencia de K adsorbido

M. A. Romero^{1,2*}, **F. Bonetto**^{1,2}, **E. A. García**¹

¹*Instituto de Física del Litoral (IFIS, UNL-CONICET), Santa Fe, Argentina*

²*Departamento de Física, Fac. de Ing. Química, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Argentina*

Es conocido que la presencia de adsorbatos en la superficie altera la función trabajo macroscópica de la misma. Localmente, los adsorbatos superficiales inducen fuertes cambios en la estructura electrónica de su entorno. Como consecuencia, es esperable que la transferencia de carga entre proyectiles y superficies se vea severamente afectada por la presencia de adsorbatos en las mismas. En el presente trabajo se estudia teóricamente de que manera el proceso de transferencia de carga se ve afectado cuando proyectiles de Li^+ colisionan con una superficie de grafeno en presencia de impurezas de K, en el límite de baja deposición.

El formalismo teórico se basa en el modelo de Anderson para describir el intercambio de carga resonante que ocurre en la colisión binaria simple entre el proyectil y el átomo adsorbido, y entre el proyectil y los átomos de C de la superficie de grafeno más cercanos al sitio de adsorción [1]. El modelo tiene en cuenta los detalles de la estructura electrónica de bandas de la superficie (grafeno más impureza). Los tres estados posibles de carga del proyectil son calculados en un proceso cuántico dependiente del tiempo donde la repulsión electrónica en el orbital de valencia tipo-s se considera grande comparado con el acoplamiento proyectil-sustrato ($U \gg V$). Se asume que las trayectorias de entrada/salida del proyectil son perpendiculares a la superficie de grafeno (colisión frontal).

Los resultados obtenidos muestran una dependencia muy diferente para la fracción de neutros dispersada por el adsorbato o por átomos de carbono lejanos a la impure-

za (ver Fig. 1). Mientras en el primer caso se observa una fuerte dependencia inducida principalmente por el carácter localizado de la DOS del K, una ligera dependencia se obtiene para la fracción de neutros/iones dispersados por átomos lejanos de C (C_3 , C_4 , C_5 , etc.). Por otro lado, una fuerte influencia del adsorbato se advierte en el estado final de carga del proyectil cuando éste colisiona con átomos de C cercanos al sitio de adsorción (átomos C_1 , C_2).

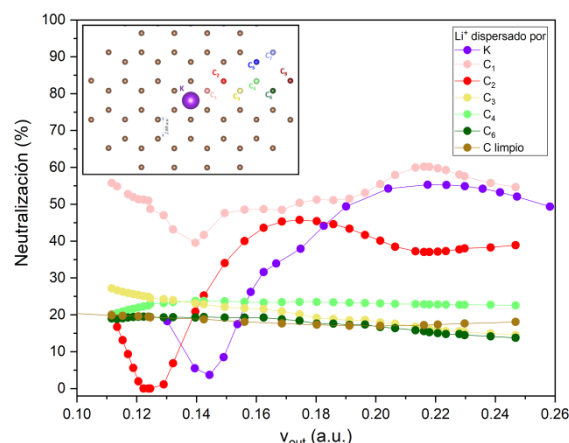


Fig. 1. Fracción de proyectiles Li neutros dispersados en función de la velocidad de salida.

Resultados preliminares muestran que aún cuando la interacción entre algunos átomos de carbono de la superficie de grafeno y el adsorbato sea no nula (reflejada a través de un ancho de hibridización apreciable de los niveles electrónicos de ionización y afinidad), el estado de carga del proyectil no es significativamente afectado.

Referencias

- [1] M. A. Romero *et al.*, Surface Science **721** 122070 (2022).

* E-mail: marcelorom23@gmail.com

Ion tracks in ultrathin polymer films: The role of the substrate

R. M. Papaléo^{1*}, R. S. Thomaz^{1,2}, I. Alencar², P.L. Grande², C. Trautmann³

¹*Escola Politécnica, Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brazil*

²*Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brazil*

³*Materials Research, GSI Helmholtz Centre, Planckstr.1, 64291 Darmstadt, Germany*

With the increasing use of nanomaterials in technological devices, the understanding of radiation effects at small target volumes has become an important issue. Several changes in either the type, yield or recovery of damage have been reported on materials under spatial confinement, including nanoparticles, nanowires or ultrathin films and 2D structures. In recent years, we have been using polymer thin and ultrathin films as a model system to investigate radiation effects of high-energy ions, where confinement happens in one dimension. For surface effects, such as cratering and particle ejection due to single ion impacts, a strong reduction in efficiency was observed in PMMA films thinner than about 40 nm [1]. The decrease in damage efficiency in thin layers has been attributed to the suppression of long-range effects arising from excited atoms lying deeply in the solid.

This raises the possibility that the substrate of the films itself may be relevant to the radiation effects seen at the top surface. Here, the role of the substrate on cratering induced by individual 1.1 GeV Au ions in ultrathin poly(methyl methacrylate) (PMMA) layers is systematically investigated. Materials of different thermal and electrical properties (Si, SiO₂, and Au) were used as substrates to deposit PMMA thin films of various thicknesses from ~1 to ~300 nm. We show that in sufficiently thin films craters are modulated by the underlying substrate to a degree that depends on the transport properties of the medium [2].

Crater size in ultrathin films deposited on the insulating SiO₂ is larger than in similar films deposited on the conducting Au layer. This is consistent with an inefficient coupling of the electronic excitation energy to the atomic

cores in metals. On the other hand, the damage on films deposited on SiO₂ is not very different from the Si substrate with a native oxide layer, suggesting, in addition, poor energy transmission across the film/substrate interface. The experimental observations are also compared to calculations from an analytical model based on energy addition and transport from the excited ion track, which describe only partially the results.

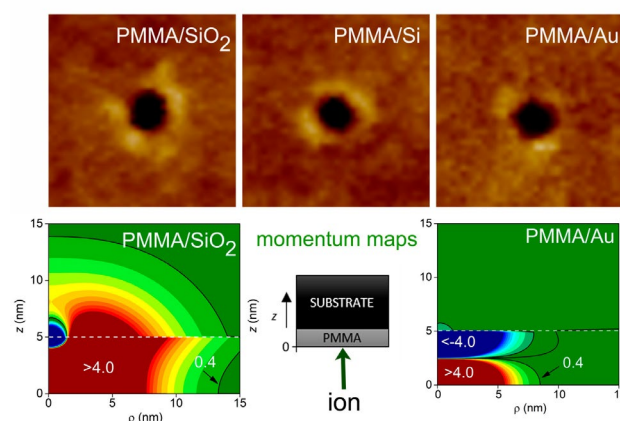


Fig. 1. AFM images of individual ion impacts in 5 nm PMMA films on different substrates. (bottom) Momentum maps derived from the sum of impulses model (ρ is the radial distance from the impact point and z is the depth), showing changes in momentum transferred to particles of the film due to the substrate. The dashed line depicts the polymer/substrate interface.

Referencias

- [1] R. M. Papaléo, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 118302 (2015).
- [2] R. S. Thomaz, *et al.*, *Curr. Appl. Phys.* **32**, 91-97 (2021).

* E-mail: papaleo@puers.br

LISTA DE PARTICIPANTES

Nombre	email	Lugar	Ciudad	País
Alves, Eduardo	ealves@ctn.tecnico.ulisboa.pt ,	IST-U.	Lisboa	Portugal
Arbó, Diego	diego@iafe.uba.ar,	IAFE	Buenos Aires	Argentina
Archubi, Claudio	archubi@iafe.uba.ar,	IAFE	Buenos Aires	Argentina
Arista, Nestor	arista001@yahoo.com,	IB - CAB	Bariloche	Argentina
Astigarreta, Moana	moastigarreta@id.uff.br	UFF	Niterói	Brasil
Aucar, Gustavo	gaucar@conicet.gov.ar	IMIT	Corrientes	Argentina
Baldiviezo, Maximiliano	maximiliano.baldiviezo@gmail.com	UNSa	Salta	Argentina
Barachina, Raúl	raul.barrachina@gmail.com,	CAB	Bariloche	Argentina
Basílio , Jorge	jorgehenriquebasilio@hotmail.com,	UFRJ	Rio de Janeiro	Brasil
Bocan, Gisela	gbocan@gmail.com,	CAB	Bariloche	Argentina
Boll, Diego	diegoboll@hotmail.com,	IFIR	Rosario	Argentina
Bolzan, Charles	charlesbolzan12@gmail.com,	UFRGS	Porto Alegre	Brasil
Buitrago, Paula	pbuitragot@gmail.com,	IFIS-Litoral	Santa Fe	Argentina
Busnengo, Fabio	busnengo@gmail.com	IFIR	Rosario	Argentina
Castro Faría, Nelson	farianv@gmail.com,	UFRJ	Río de Janeiro	Brasil
da Silveira, Enio	enio@vdg.fis.puc-rio.br,	PUC-Rio	Río de Janeiro	Brasil
de Sanctis, María Laura	mdesantis@ifir-conicet.gov.ar	IFIR	Rosario	Argentina
de Vila Bauer, Deiverti	deiverti.bauer@gmail.com,	UFRGS	Porto Alegre	Brasil
Dias, Johnny	jfdias@if.ufrgs.br	UFRGS	Porto Alegre	Brasil
Esponda, Nicolás	nicolas.esponda@gmail.com,	IFIR	Rosario	Argentina
Etchevery, Louise	louise.etcchevery33@gmail.com,	UFRGS	Porto Alegre	Brasil
Fadanelli, Raul	raulcarlosbr@gmail.com,	UFRGS	Porto Alegre	Brasil
Fainstein, Pablo	pfainstein@gmail.com,	CAB	Bariloche	Argentina
Fichtner, Paulo	paulo.fichtner@ufrgs.br	UFRGS	Porto Alegre	Brasil
Fiori, Marcelo	marcelorfiori@gmail.com	UNSa	Salta	Argentina
Fojón, Omar	omarfojon@gmail.com,	IFIR	Rosario	Argentina
Fonteles, Henrique	fonteleshenrique@gmail.com,	UFRGS	Porto Alegre	Brasil
Frisco, Leandro	leandrofrisco@gmail.com,	IAFE	Buenos Aires	Argentina
Galassi, Mariel	mariel.galassi@gmail.com,	IFIR	Rosario	Argentina
García, Evelina	egarcia1201@hotmail.com,	IFIS-Litoral	Santa Fe	Argentina
Garibotti, Roberto	crgaribotti@yahoo.com,	IB	Bariloche	Argentina
Giraldi, André	ddrocco@hotmail.com,	UFRJ	Río de Janeiro	Brasil

Grande, Pedro	plgrande@gmail.com,	UFRGS	Porto Alegre	Brasil
Gravielle, María Silvia	msilvia@iafe.uba.ar,	IAFE	Buenos Aires	Argentina
Guarda, Tamara	tamaraayelenguarda@gmail.com,	CAB	Bariloche	Argentina
Guzman, Judith	judithamiraguzman@gmail.com,	UNSa	Salta	Argentina
Hoyos, Elena	hoyosele@gmail.com,	UNSa	Salta	Argentina
Jalbert, Ginette	ginettejalbert@gmail.com,	UFRJ	Río de Janeiro	Brasil
Laurent, Guillaume	glaurent@auburn.edu	Auburn University	Auburn	USA
López, Sebastián	sebastlop@iafe.uba.ar,	IAFE	Buenos Aires	Argentina
Medina, Aline	alinemedina@if.ufrj.br,	UFRJ	Río de Janeiro	Brasil
Mejía, Christian	cfmejiag@gmail.com,	U. de Cuenca	Cuenca	Ecuador
Mendez, Alejandra	alemendez@iafe.uba.ar,	IAFE	Buenos Aires	Argentina
Mérida, Elías	meridaelias@gmail.com,	UNSa	Salta	Argentina
Miraglia, Jorge	miraglia@iafe.uba.ar	IAFE	Buenos Aires	Argentina
Mitnik , Darío	dmitnik@iafe.uba.ar	IAFE	Buenos Aires	Argentina
Montanari, Claudia	mclaudia@iafe.uba.ar	IAFE	Buenos Aires	Argentina
Montenegro, Eduardo	montenegro@if.ufrj.br,	UFRJ	Río de Janeiro	Brasil
Monti, Juan Manuel	juanmonti@gmail.com,	IFIR	Rosario	Argentina
Morales, Martín	morales.martin.alberto@gmail.com,	UNSa	Salta	Argentina
Oliveira, Vinicius	vinicius.oliv@usp.br,	USP	San Pablo	Brasil
Peralta, Jesica	peraltajesica25@gmail.com,	IAFE	Buenos Aires	Argentina
Pérez, Pablo	perezpablod@gmail.com	CAB	Bariloche	Argentina
Perlin, Amir	a.mir.l@hotmail.com,	UFRJ	Río de Janeiro	Brasil
Pessanha, Vinicius	viniciuspessanha1@gmail.com,	PUC-Rio	Río de Janeiro	Brasil
Pitthan, Eduardo	eduardo.pitthan@physics.uu.se,	Uppsala University	Upsala	Suecia
Rivarola, Roberto	rivarola@fceia.unr.edu.ar	IFIR	Rosario	Argentina
Rodriguez Taboada, Rocío	rociotaboada@gmail.com,	UNSa	Salta	Argentina
Rodríguez, Vladimir	vladimirrch@gmail.com,	FCEyN, UBA	Buenos Aires	Argentina
Rojas, María Fernanda	mariarojasmafer@gmail.com,	IFIR	Rosario	Argentina
Romero, Marcelo	marcelorom23@gmail.com,	IFIS-Litoral	Santa Fe	Argentina
Sant'Anna, Marcelo	mms@if.ufrj.br	UFRJ	Río de Janeiro	Brasil
Seabra, Caroline	caroline-seabra@id.uff.br,	UFF	Niterói	Brasil
Segui, Silvina	silvinasegui@gmail.com,	IFEG	Córdoba	Argentina

Selau, Felipe	ffselau@gmail.com,	UFRGS	Porto Alegre	Argentina
Sigaud, Lucas	lsigaud@id.uff.br,	UFF	Niterói	Brasil
Stolterfoht, Nikolaus	nico@stolterfoht.com,	HZB	Berlín	Alemania
Strubbia, Camila	camilastrubbia@outlook.com,	UNR	Rosario	Argentina
Trombini, Henrique	henrique.trombini@ufcspa.edu.br,	UFCSPA	Porto Alegre	Brasil

Indice de Autores Participantes

Autor	Página
Alves, Eduardo	3,26
Arbó, Diego	4,5,6,8,33,41,63,83
Archubi, Claudio	3,24
Arista, Nestor	3,23,24,36
Astigarreta, Moana	2,12
Baldiviezo, Maximiliano	3,21
Barrachina, Raúl	4,6,32,62
Basílio , Jorge	4,5,6,31,42,43,60
Bocan, Gisela	2,14
Boll, Diego	2,17
Bolzan, Charles	5,45
Buitrago, Paula	5,46
Busnengo, Fabio	2,13
da Silveira, Enio	4,5,6,7,29,47,48,49,65,66,77
de Sanctis, María Laura	5,50
de Vila Bauer, Deiverti	5,6,44,55
Dias, Johnny	2,5,6,10,44,55
Esponda, Nicolás	5,6,7,51,52,53,80
Etcheverry, Louise	2,18
Fadanelli, Raul	6,54,61
Fainstein, Pablo	2,19
Fichtner, Paulo	2,8,15,81
Fiori, Marcelo	7,72,74
Fojón, Omar	5,50
Fonteles, Henrique	6,55

Frisco, Leandro	6,56,57
Galassi, Mariel	4,6,8,34,58,82
García, Evelina	6,8,59,84
Garibotti, Roberto	4,39
Giraldi, André	6,60
Grande, Pedro	6,7,8,10,37,54,55,61,71,81
Gravielle, María Silvia	6,7,14,56,57,69
Guarda, Tamara	6,32,62
Guzmán, Judith	6,63
Laurent, Guillaume	2,16
López, Sebastián	4,5,6,8,33,41,42,43,63,83
Medina, Aline	4,30
Mejía, Christian	6,7,66,67
Mendez, Alejandra	3,5,7,27,42,43,72,73
Miraglia, Jorge	3,7,22,68,69
Mitnik , Darío	27
Montanari, Claudia	5,7,22,68,69
Montenegro, Eduardo	12,20
Monti, Juan Manuel	2,5,7,11,51,52,53,79,80
Oliveira, Vinicius	7,71
Peralta, Jesica	7,72,73,74
Pérez, Pablo	7,75
Perlin, Amir	7,76
Pessanha, Vinicius	7,77
Pitthan, Eduardo	3,28
Rivarola, Roberto	4,5,6,7,51,52,53,79,80
Rodríguez, Vladimir	7,78
Rojas, María Fernanda	7,79,80

Romero, Marcelo	6,8,59,84
Sant'Anna, Marcelo	4,35
Seabra, Caroline	3,25
Segui, Silvina	4,36
Selau, Felipe	6,7,8,37,54,71,81
Sigaud, Lucas	3,12,20
Stolterfoht, Nikolaus	4,38
Strubbia, Camila	8,82
Trombini, Henrique	4,6,7,8,37,54,71,81