

# ENCUENTRO NACIONAL DE DINÁMICA CUÁNTICA DE LA MATERIA DCM-2019

## Comité Organizador

- Diego Arbó
- María Silvia Gravielle
- Darío Mitnik
- Claudia Montanari
- Vladimir Rodríguez

### Contacto

email: [dcm-2019@iafe.uba.ar](mailto:dcm-2019@iafe.uba.ar)

Teléfono: (+54-11) 5285-7860

## Agradecimientos

***Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) e Instituto de Astronomía y Física del Espacio (IAFE – Conicet – UBA)***

CONICET



## RESEÑA

*El comité organizador del ENCUENTRO NACIONAL DE DINÁMICA CUÁNTICA DE LA MATERIA (DCM-2019) los invita cordialmente a participar de esta primera reunión nacional el 2 y 3 de setiembre de 2019 en el Instituto de Astronomía y Física del Espacio (IAFE, UBA-CONICET), Ciudad Universitaria, Buenos Aires. Los temas de interés comprenden las colisiones de partículas y de fotones con la materia.*

*Esta primera edición de la reunión cuenta con una sesión especial en honor a la trayectoria del Prof. Dr. Jorge Miraglia, quien desarrolló una extensa y destacada trayectoria de investigación en el país, abocada al estudio de la dinámica cuántica en la materia, alcanzando las máximas categorías tanto del CONICET – Investigador Superior – como de la Universidad de Buenos Aires – Profesor Titular. Su sobresaliente y fructífera labor de investigación, que abarca una enorme variedad de temáticas distintas dentro del campo de las colisiones atómicas y con la materia condensada, lo ha posicionado como un reconocido y notorio especialista a nivel mundial, habiendo obtenido en 2018 el Premio Consagración en Física otorgado por la Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales.*

*El Dr. Miraglia se graduó en Ciencias Físicas en la Universidad Nacional de Rosario en 1975 y en 1980 obtuvo su doctorado en Física en la Universidad Nacional de La Plata, bajo la dirección del Dr. Garibotti. Luego de exitosas estancias post-doctorales en la University of Durham, Inglaterra, y en la Université de Bordeaux, Francia, regresó al país como investigador de CONICET, fundando el grupo de Dinámica Cuántica en la Materia del Instituto de Astronomía y Física del Espacio - IAFE, (UBA-CONICET). En dicho grupo se han formado numerosos estudiantes e investigadores bajo la supervisión directa del Dr. Miraglia. En total, el Dr. Miraglia ha dirigido nueve tesis doctorales, cinco tesis de licenciatura, y más de veinte profesionales, entre becarios doctorales, post-doctorales e investigadores asistentes de CONICET, varios de los cuales*

*posteriormente desarrollaron brillantes trayectorias en el exterior o bien iniciaron sus propias líneas de investigación en otras instituciones del país, contribuyendo al desarrollo federal de la temática.*

*Por otra parte, junto con esta sobresaliente tarea de formación de investigadores, el Dr. Miraglia desarrolló una extensa labor docente, habiéndose desempeñado como Profesor Titular de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad de Buenos Aires hasta 2016, además de su actividad como profesor invitado en el exterior (Université de Bordeaux, Francia; University of Tennessee, EEUU).*

*En lo que se refiere a la destacada labor de investigación desarrollada por el Dr. Miraglia, ella se ha traducido en más de 145 publicaciones en las revistas científicas de más alto impacto de la especialidad, incluyendo cerca de 90 artículos en *Physical Review A* (American Physical Society, EEUU) y más de 25 en *Journal of Physics B* (Institute of Physics, Reino Unido). A ello se suman 6 capítulos de libros y más de un centenar de contribuciones en conferencias internacionales con referato, sin contar sus aportes en diferentes reuniones nacionales y latinoamericanas. La jerarquía y variedad de las investigaciones desarrolladas por el Dr. Miraglia durante su carrera científica le han valido su participación en diferentes comités internacionales, entre los que se destacan el General Committee (1987-1991) y el Executive Committee (2003-2005) de la International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collision (ICPEAC), la cual es la mayor organización de la especialidad a nivel mundial.*

# Programa del DCM-2019

## Lunes 2 de septiembre

8:45-9:10	<b>Bienvenida, Inscripción y apertura</b>
Chair: M.S. Gravielle	<b>Sesión Lu-1</b>
9:10-9:45	<i>About the physics of irradiation of biological matter with ion beams.</i> <b>R. Rivarola</b> , Instituto de Física Rosario (UNR-CONICET).
9:45-10:10	<i>Separación Isotópica por Láser con Haces Moleculares Supersónicas</i> <b>P. Fainstein</b> , Centro Atómico Bariloche, CNEA. CONICET.
10:10-10:35	<i>La matemática detrás de la física: Desde la física atómica a la neurociencia.</i> <b>G. Gasaneo</b> , Universidad Nacional del Sur.
10:35-11:00	<b>Café</b>
Chair: D. Arbó	<b>Sesión Lu-2</b>
11:00-11:25	<i>Pasado, presente y futuro del cálculo científico con tarjetas gráficas</i> <b>F. Colavecchia</b> , Centro Atómico Bariloche, I. Balseiro. CNEA CONICET.
11:25-11:50	<i>Interferences in photoionization of atoms and molecules interacting with attopulses</i> <b>O. Fojón</b> , Instituto de Física Rosario (UNR-CONICET).
11:50-12:15	<i>Radiosimetry endpoints obtained with the tilda-V Monte Carlo tracking structure code</i> <b>M. Quinto</b> , Instituto de Física Rosario (IFIR) (CONICET-UNR).
12:15-14:30	<b>Almuerzo</b>
Chair: R. Rivarola	<b>Sesión Lu-3</b>
14:30-15:05	<i>Milestones of charged particle guiding through insulating capillaries.</i> <b>N. Stolterfoht</b> , Helmholtz-Zentrum Berlin, Germany.
15:05-15:30	<i>Molecule-surface reactive scattering at low energies: CH<sub>4</sub>/Ir(111).</i> <b>F. Busnengo</b> , Instituto de Física de Rosario.
15:30-15:55	<i>A time dependent potential model for charge-state dependent stopping of slow highly charged ions in graphene</i> <b>P. Grande</b> , Laboratório de Implantação Iônica, Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil.
15:55-17:00	<b>Café y pósters</b>
Chair: D. Mitnik	<b>Sesión Lu-4</b>
17:00-17:25	<i>Fotoionización de átomos y moléculas por pulsos láser</i> <b>R. Della Picca</b> , CONICET y Centro Atómico Bariloche.
17:25-18:00	<i>Los presupuestos fundamentales que han regido la historia de la Física y las controversias en torno a la existencia de materia oscura.</i> <b>L. Levinas</b> , UBA-CONICET.

**Martes 3 de septiembre**

Chair: P. Grande	<b>Sesión Ma-1</b>
9:10-9:45	<i>Charge transfer in low-energy collisions of protons with different surfaces: strong signals of the surface band structure.</i> <b>E. Goldberg</b> , Instituto de Física del Litoral (CONICET-UNL).
9:45-10:10	<i>Dispersión de iones en películas de germaneno sobre Au(111) y Al(111)</i> <b>O. Grizzi</b> , Centro Atómico Bariloche, Instituto Balseiro. CNEA. CONICET.
10:10-10:35	<i>Simulaciones de dinámica molecular clásica incluyendo efectos electrónicos</i> <b>E. Bringa</b> , CONICET, Universidad de Mendoza.
10:35-11:00	<b>Café</b>
Chair: J. Fiol	<b>Sesión Ma-2</b>
11:00-11:25	<i>GIFAD for He/KCl(001): Unexpected rainbow angle increase for low-<math>E_{\perp}</math> incidence</i> <b>G. Bocan</b> , Instituto de Nanociencia y Nanotecnología - Nodo Bariloche.
11:25-11:50	<i>Entropías de Entrelazamiento en Sistemas Continuos</i> <b>P. Serra</b> , FaMAF - Universidad Nacional de Córdoba e IFEG - CONICET.
11:50-12:15	<i>Implementación de métodos de aprendizaje automatizado en problemas colisionales</i> <b>A. Méndez</b> , Instituto de Astronomía y Física del Espacio (UBA-CONICET), Buenos Aires
12:15-14:30	<b>Almuerzo</b>
Chair: J. Ferrón	<b>Sesión Ma-3</b>
14:30-15:05	<i>Fragmentação múltipla de moléculas.</i> <b>E. Montenegro</b> , Universidade Federal do Rio de Janeiro.
15:05-15:30	<i>Sobre cómo las incertezas clásicas debilitan la coherencia cuántica.</i> <b>R. Barrachina</b> , Comisión Nacional de Energía Atómica.
15:30-15:55	<i>Recoil ion momentum spectroscopy studies of electron capture and ionization in ion-atom and ion-molecule collisions</i> <b>S. Otranto</b> , IFISUR, Bahía Blanca.
15:55-16:30	<b>Café</b>
Chair: C. Montanari	<b>Sesión Ma-4</b>
16:30-16:55	<i>Ab-initio calculations of stopping power in crystalline solids</i> <b>A. Correa</b> , Lawrence Livermore National Laboratory, EEUU.
16:55-17:30	<i>El cuento de hadas de la tapata o "Qué es eso?"</i> <b>N. Stolterfoht</b> , Helmholtz-Zentrum Berlin, Germany.
17:30-17:45	<i>Conclusiones</i> <b>R. Garibotti</b> , Centro Atómico Bariloche.
20:30-23:00	<b>Cena de la conferencia en La Parolaccia</b>

## Lista de Posters

<p style="text-align: center;"><i>1.</i></p> <p style="text-align: center;">MOIRÉ PATTERNS IN MOMENTUM MAPS FOR ATOMIC PHOTOIONIZATION <b>Martín Dran y Diego Arbó</b></p>
<p style="text-align: center;"><i>2.</i></p> <p style="text-align: center;">HOLOGRAPHIC INTERFERENCE IN PHOTOELECTRON SPECTRA <b>Sebastián López y Diego Arbó</b></p>
<p style="text-align: center;"><i>3.</i></p> <p style="text-align: center;">TIME DELAYS IN ABOVE-THRESHOLD <math>\omega</math>-<math>2\omega</math> IONIZATION OF ARGON <b>S. D. López, S. Donsa, S. Nagele, J. Burgdörfer y D. G. Arbó</b></p>
<p style="text-align: center;"><i>4.</i></p> <p style="text-align: center;">EFECTO DE ENFOQUE Y TRANSICIÓN DE DISTRIBUCIONES CUÁNTICAS ACLÁSICAS <b>L. Frisco, J. E. Miraglia y M. S. Gravielle</b></p>
<p style="text-align: center;"><i>5.</i></p> <p style="text-align: center;">FULLY DIFFERENTIAL STUDY OF THE IONIZATION OF H<sub>2</sub>O BY LIGHT PARTICLE-IMPACT <b>Emiliano Acebal y Sebastian Otranto</b></p>
<p style="text-align: center;"><i>6.</i></p> <p style="text-align: center;">CROSS SECTIONS SCALING LAW FOR H<sub>2</sub>O IONIZATION BY HIGHLY-CHARGED IONS <b>S. Otranto, N. Bachi y R. E. Olson</b></p>
<p style="text-align: center;"><i>7.</i></p> <p style="text-align: center;">EFECTO DE LAS VIBRACIONES TÉRMICAS SOBRE LOS PATRONES DE INTERFERENCIA DE ÁTOMOS RÁPIDOS DISPERSADOS DESDE SUPERFICIES CRISTALINAS <b>M. S. Gravielle</b></p>
<p style="text-align: center;"><i>8.</i></p> <p style="text-align: center;">THEORETICAL MODELS OF ENERGY LOSS MOMENTS FOR SOLID TARGETS BOMBARDED BY PROTONS AND CORRELATED PROTONS <b>C. D. Archubi y N. R. Arista</b></p>
<p style="text-align: center;"><i>9.</i></p> <p style="text-align: center;">IONIZACIÓN DE LA CAPA L DE BLANCOS SÓLIDOS: TA (Z=73), W (Z=74), PT (Z=78), AU (Z=79), PB (Z=82), BI (Z=83), TH (Z=90), U (Z=92) <b>Alejandra Mendez, Claudia Montanari y Darío Mitnik</b></p>
<p style="text-align: center;"><i>10.</i></p> <p style="text-align: center;">PÉRDIDA DE ENERGÍA DE IONES EN SÓLIDOS Y EL COLAPSO DE LA CAPA 4F <b>Alejandra Mendez, Claudia Montanari, Darío Mitnik y Jorge Miraglia</b></p>
<p style="text-align: center;"><i>11.</i></p> <p style="text-align: center;">OPTICAL TOMOGRAPHY TREATED WITH THE FOURIER CONTINUATION METHOD <b>E.L. Gaggioli, O.P. Bruno y D.M. Mitnik</b></p>
<p style="text-align: center;"><i>12.</i></p> <p style="text-align: center;">MÉTODOS DE APRENDIZAJE AUTOMÁTICO PARA LA OBTENCIÓN DE POTENCIALES EFECTIVOS <b>Di Filippo Juan Ignacio, Mitnik Darío, López Sebastián y Mendez Alejandra</b></p>

# RESÚMENES DE LAS CHARLAS

## ABOUT THE PHYSICS OF IRRADIATION OF BIOLOGICAL MATTER WITH ION BEAMS

R. D. Rivarola<sup>1</sup>, M. A. Quinto<sup>1</sup>, J. M. Monti<sup>1</sup>, O. A. Fojón<sup>1</sup> and C. Champion<sup>2</sup>

1) Instituto de Física Rosario (CONICET and Universidad Nacional de Rosario), Rosario, Argentina  
 2) CELIA, Université de Bordeaux, Talence, France

Modeling the radiobiological damages induced by ionizing particle beams traversing the living matter requires a precise knowledge of the full radiation history.

Different electronic reactions involving electron ionization and charge exchange appear as main candidates to give an appropriate description of the process. Usually the living matter is described as liquid or gaseous water, but a realistic representation of the biological tissue must also include the presence of DNA and RNA compounds.

In this work, by using quantum-mechanical models, differential and total cross sections corresponding to different molecular targets irradiated with single and multiple charged ions impacting at intermediate and high collision velocities are presented. Among them, we must thus mention not only the water, but also the four nucleobases (adenine, cytosine, thymine and guanine) as well as the sugar-phosphate backbone of DNA and the RNA uracil.

When possible, theoretical predictions are contrasted with existing experimental data. The role of Auger emission in electron capture and ionization reactions is also evaluated.

In order to gain insight into the real energy deposit cartography induced by ion impact in the biological medium, the main energy deposit in water is compared to its homologous in a realistic DNA medium. With such a goal in mind, we consider a biological medium composed by hydrated DNA, simulated by adding 18 water molecules per nucleotide in order to contrast with dry DNA [1].

The results are incorporated in a recently developed Monte Carlo code TILDA-V [2] (acronym of Transport d'Ions Lourds Dans l'Aqua & Vivo) to determine the energy deposition patterns at nanometer scale in a simplified description of the cellular nucleus. TILDA-V is an extension of the TILDA Monte Carlo code previously introduced [3]. Emphasis will be given on the endpoints of the projectile track.

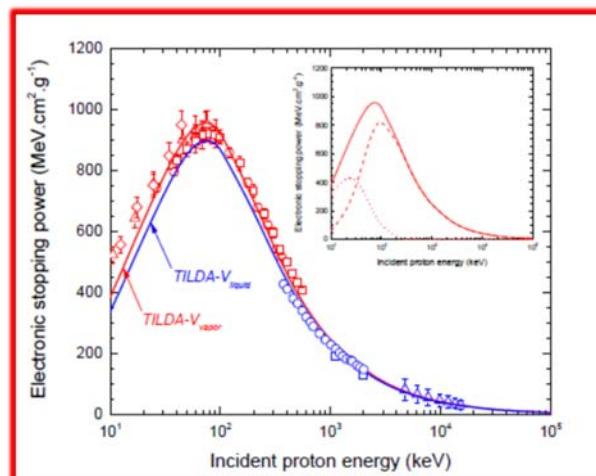


Figure 1: Electronic stopping power in liquid water and water vapor. Inset: Total stopping power (full line), Contributions of  $H^+$  (dashed line) and  $H^0$  (dotted line).

## References

- [1] Champion C *et al.* Phys. Med. Biol. **60** 7805 (2015).  
 [2] Quinto MA *et al.* Eur. Phys. J. **D71**:130 (2017).  
 [3] Champion C *et al.* Radiat. Res. **163** 222 (2005).

## SEPARACIÓN ISOTÓPICA POR LÁSER CON HACES MOLECULARES SUPERSÓNICOS

Pablo Fainstein

Subgerencia Aplicaciones de la Tecnología Láser, Gerencia Proyecto LASIE, CNEA

El uso de materiales cuya composición isotópica natural ha sido alterada es de gran interés en distintas aplicaciones como medicina nuclear y semiconductores. En la industrial nuclear el enriquecimiento de uranio juega un rol fundamental en la fabricación de combustibles para los reactores nucleares. El llamado bajo enriquecimiento consiste en modificar la composición isotópica natural, que contiene un 0,71% de U-235, a un material con una composición de entre 1 y 3% de dicho isótopo. En particular, en Argentina este combustible será un elemento fundamental del nuevo reactor modular CAREM que está construyendo la CNEA.

A partir de 2010, con el re lanzamiento del Plan Nuclear Argentino se reactivaron los trabajos de investigación y desarrollo en los métodos tradicionales de enriquecimiento de Uranio que han llegado hasta el nivel industrial (difusión y centrifugación gaseosa) y en el más novedoso método de separación isotópica por láser. Para este último caso se creó específicamente el Proyecto Laboratorio Argentino de Separación Isotópica y Enriquecimiento (LASIE).

En esta presentación se discutirán los principios físicos del proceso y los avances realizados hasta el presente.

## LA MATEMÁTICA DETRÁS DE LA FÍSICA: DESDE LA FÍSICA ATÓMICA A LAS NEUROCIENCIAS

Gustavo Gasaneo

Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca, Argentina

En esta charla abordaremos la universalidad del lenguaje que subyace detrás de la física. Particularmente discutiremos aspectos que tienen que ver con la teoría de colisiones atómicas y su representación matemática asociada a las ecuaciones diferenciales y a soluciones que tales como las correspondientes a un problema de fotoionización. Veremos que no solo las herramientas sino también las soluciones halladas en la física atómica aparecen también en áreas de las neurociencias vinculadas a los movimientos oculares. Esto permite dar más relevancia al lenguaje que se aprende al tratar ciertos problemas de física atómica pensando en el hecho de que lo aprendido es luego aplicable a muy diversas y variadas áreas de las ciencias.

PASADO, PRESENTE Y FUTURO DEL  
CÁLCULO CIENTÍFICO CON TARJETAS GRÁFICAS

Flavio D. Colavecchia\*†

\*Centro de Medicina Nuclear y Radioterapia Bariloche,  
Comisión Nacional de Energía Atómica, Argentina

†Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (Conicet), Bariloche, Argentina

Una tarjeta gráfica o GPU (del inglés, *Graphical Processing Unit*) es el componente de hardware de una computadora encargado de procesar la información visual de salida. Si bien existen desde mediados de los años 90, su uso para cálculo científico y/o tecnológico se expande aceleradamente a partir de la introducción de CUDA[1], una extensión del lenguaje C específica para GPUs. Las GPUs funcionan como un coprocesador matemático masivamente paralelo, complementario al cálculo que puede desarrollar una CPU usual. A diferencia de las CPUs, las tarjetas gráficas contienen miles de procesadores específicamente diseñados para llevar adelante cómputo numérico.

Si bien en su origen el uso de GPUs estaba orientado a la producción de código *in-house*, las aplicaciones de las GPUs en el cálculo científico y tecnológico se han ido extendiendo. En la actualidad existen una gran cantidad de bibliotecas que permiten utilizar todo el poder de cálculo de las GPUs desde distintos lenguajes de alto nivel más allá de C (por ejemplo, transformadas rápidas de Fourier[2]), pasando a aplicaciones matemáticas como el álgebra lineal numérica[3], e incluso paquetes de cálculo para lenguajes de dominio específico[4]. Asimismo, han permitido la revolución de la aplicación de los algoritmos de Aprendizaje Profundo (*Deep Learning*) a la Inteligencia Artificial, desde el reconocimiento facial, la aplicación de la programación de lenguaje natural hasta la conducción automática de vehículos terrestres y aéreos.

En esta presentación repasaré algunas de las características más importantes de la compu-

tación científica con GPU. Además de una breve descripción de sus capacidades, presentaré algunos resultados en cálculo de secciones eficaces con métodos de onda distorsionada para tres y cuatro cuerpos[5], la utilización de algoritmos de convolución en cálculo de dosis en radioterapia[6] y la detección automática de estructuras en estudios médicos con resonancia magnética nuclear[7].

## Referencias

- [1] NVIDIA, CUDA Programming Guide 1.1 (2007).
- [2] NVIDIA, CUDA Fast Fourier Transform (2019).
- [3] Bosma, W; Cannon, J. and Playoust, C.; *J. Symbolic Comput.*, **24**, 235–265 (1997).
- [4] R Core Team *R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing* (Vienna, Austria).
- [5] Colavecchia, FD; Schulz, M; Kirchner, T; Ciappina, MF; *J. of Phys. Conf. Ser.* **875** 052011 (2017).
- [6] Carrasco, D; Cappagli, P; Colavecchia, FD; *Latin American High Performance Computing Conference* 307–318 (2017).
- [7] Curiale, AH; Colavecchia, FD; Mato, G; *Comp. Meth. Prog. Biomed.* **169** 37–50 (2019).

## INTERFERENCES IN PHOTOIONIZATION OF ATOMS AND MOLECULES INTERACTING WITH ATTOPULSES

Fojón, Omar Ariel<sup>1,2</sup>

- 1) Instituto de Física Rosario (CONICET-UNR), 27 de febrero 210 bis, Rosario, Argentina  
 2) Escuela de Ciencias Exactas y Naturales, FCEIA, UNR, Pellegrini 250, Rosario, Argentina

We present a review of our research on interference effects observed in the photoelectron spectra from atoms and molecules induced by attopulses assisted by lasers. In 2001, the obtention of attopulses (ATP) or train of attopulses (ATPT) with durations of hundreds of attoseconds gave birth to Attophysics where the typical experiment is the pump-and-probe scheme. When an atom or molecule is ionized by an extreme ultraviolet (XUV) attopulse (pump), then the photoelectron spectra may be modulated (probe) by an assisting near infrared laser (NIR). This leads to the appearance of new coherence effects coming from interferences between the ATP and the NIR.

We first put in evidence interference effects coming from the coherent emission from the centers of molecular targets [1]. In particular, we present recent results for photoionization of water molecules where we trace interferences in the total and differential cross sections [2]. Moreover, we analyze photoelectron spectra produced by ATPs and ATPTs assisted by NIR [3,4] acting on atoms and molecules. We observe not only patterns coming from the coherent emission but also satellite interferences due to the presence of the laser field. By using a separable Coulomb-Volkov model (SCV), we study the photoelectron angular distribution (AD) of atoms and simple diatomic molecules, for different ATPT and NIR polarizations. In Fig. 1, interferences in the channels opened by the NIR give place to a different behavior of the AD by simply changing the delay between the XUV ATPT and the NIR [5]. This is a simple example illustrating one of the objectives of Attophysics, i.e., to reach accurate control of electron processes in atomic and molecular samples in real time.

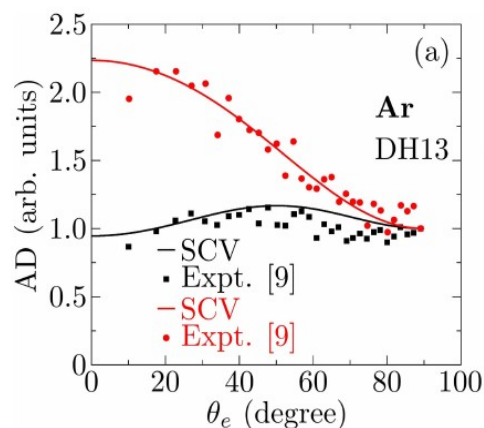


Figure 1: Angular Distributions (AD) for photoionization of Ar for the 13th Dressed Harmonic (DH) line by an ATPT delayed with respect to a NIR assistant laser (801.4 nm and  $1.3 \cdot 10^{12} \text{ W cm}^{-2}$ ) by  $0.144 \pi$  (red) and  $0.644 \pi$  (black). Expt. from [6].

### References

1. M. Ciappina, O Fojón and R. Rivarola, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **47**, 042001 (2014).
2. M Lara, D Boll, O Fojón, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **52**, 105204 (2019).
3. D Boll and O Fojón, *Phys. Rev. A* **90**, 053414 (2014).
4. D Boll, O Fojón, C McCurdy, and A Palacios, *Phys. Rev. A* **99**, 023416 (2019).
5. D Boll and O Fojón, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **49**, 185601 (2016).
6. Y Picard et al, *Phys. Rev. A* **89**, 031401 (2014)

## RADIODOSIMETRY ENDPOINTS OBTAINED WITH THE TILDA-V MONTE CARLO TRACKING STRUCTURE CODE

M. A. Quinto<sup>1\*</sup>, M. E. Alcocer-Avila<sup>2</sup>, J. M. Monti<sup>1</sup>, P. F. Weck<sup>3</sup>, O. A. Fojón<sup>1</sup>, R. D. Rivarola<sup>1</sup> and C. Champion<sup>2</sup>

- 1) Instituto de Física Rosario, CONICET and Universidad Nacional de Rosario, Rosario, S2000EKF, Argentina
- 2) CELIA, Université de Bordeaux, CNRS, CEA, UMR 5107, F-33405, Talence, France
- 3) Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM 87185, USA

In radiobiology, predicting the evolution of irradiated biological samples is still nowadays an active field of research to identify DNA lesions or to adapt the radiotherapeutic protocols in radiation oncology. In this context, the numerical methods, based on Monte Carlo track-structure simulations, represent the most suitable and powerful tools for understanding the radiobiological damage induced by ionizing particles. However, most existing Monte Carlo track-structure codes require a large set of input data (cross sections) to describe at the atomic scale the various particle-induced interactions in the medium of interest (water in liquid/vapor phase and DNA). Also, the reliability of such numerical methods heavily depends on the accuracy of the input data used in the simulations, namely, the interaction cross sections needed for describing the various collisional processes involved in the slowing-down of the charged particles in the medium of interest [1].

In the present work, we report micro-dosimetry results obtained with the track-structure code *TILDA-V* [2]. *TILDA-V* (a French acronym for Transport d'Ions Lourds Dans l'Aqua & Vivo) is a code for modeling heavy ion and secondary electron histories in vapor water for impact energies ranging from 10 keV/u to 100 MeV/u. This current version is based on a complete set of quantum-mechanically calculated multiple differential and total cross sections to describe all the inelastic processes (ionization and electron capture) occurring throughout the slowing-down of ions in water as well in DNA components (adenine (A), thymine (T), cytosine (C), guanine (G) and sugar phosphate (SP) backbone) [3]. Figure 1 reports the energy deposition of proton radiation in cylinder of height

and radius  $2 \times 1$  nm,  $10 \times 2.5$  nm and  $25 \times 12.5$  nm. We choose these dimension since they represent the geometrical model of DNA segment, nucleosome and chromatin fiber, respectively.

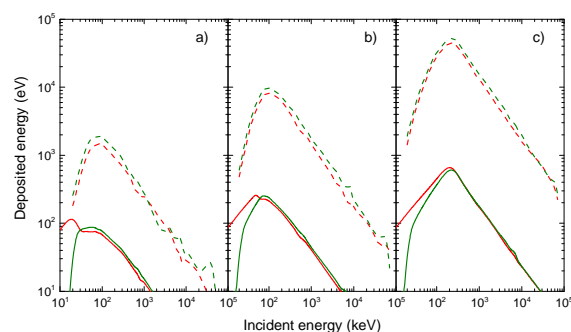


Figure 1: Energy deposition in cylinders with height and radius:  $2 \times 1$  nm (panel a),  $10 \times 2.5$  nm (panel b) and  $25 \times 12.5$  nm (panel c), respectively. Deposited energy by proton (solid line) and by secondary electrons (dashed line). Cylinders filled with water vapor (red lines) and hydrated DNA (green lines) [4].

SNL is managed and operated by NTESS under DOE NNSA contract DE-NA0003525

### References

- [1] C. Champion *et al.*, *Phys. Med. Biol.* **60**, 7805–7828 (2015)
- [2] M. A. Quinto *et al.*, *Eur. Phys. J. D* **71**, 130 (2017)
- [3] M. A. Quinto *et al.*, *Eur. Phys. J. D* **71**, 35 (2017)
- [4] M. A. Quinto *et al.*, *Radiat. Phys. Chem.* *In press* (2019)

# MILESTONES OF CHARGED PARTICLE GUIDING THROUGH INSULATING CAPILLARIES

Nikolaus Stolterfoht

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

After the first observation that keV ions are guided through insulating nanocapillaries [1], the topic has received considerable attention during the past decade. The essential property of the capillary guiding is a self-organizing process, which governs the charge deposition inside the capillaries. 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.

First, milestones of the field are summarized in accordance with a recent review concerning the studies of capillary guiding [2]. Emphasis is given to the guiding of highly charged ions in the keV energy range. Phenomena occurring with nano- and macro-capillaries are compared. It is shown that single conical capillaries can be used to produce a microbeam for various applications including the analysis of biological matter.

Then, apart from the experimental studies, theoretical concepts of capillary guiding are presented. In figure 1 an example of simulations for ion guiding is shown. Highly charged  $\text{Ne}^{7+}$  ions incident at  $3^\circ$  are assumed to stick at the surface producing charge patches. They create a deflecting Coulomb field in which ion trajectories are calculated. When the field becomes sufficient, the ions are deflected to the opposite capillary wall where they create a second charge patch and later a third one on the original wall. The ions are guided to the capillary exit where they leave the capillary under oscillating angle. The oscillation of the ion emission angle was shown to be in accordance with the experimental observations.

Finally, results are discussed concerning recent developments of the field. Significant differences

between guiding of ions and electrons are pointed out. Ions are deflected at charge patches in front of the surface whereas electrons enter into the capillary bulk suffering collisions with individual atoms. Furthermore, recent studies [3] with straight capillaries using a microbeam of MeV-protons are critically analyzed. It is found that the shape of the microbeam plays a decisive role in the guiding process. Altogether, it is evidenced that studies of capillary guiding revealed several novel phenomena

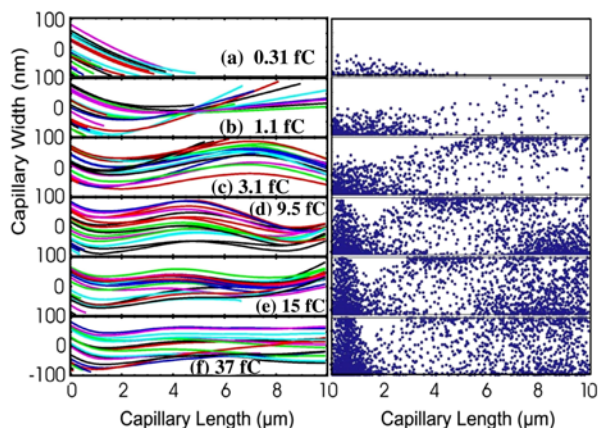


Figure 1: Trajectories of 3 keV  $\text{Ne}^{7+}$  ions and corresponding distributions of the deposited charges (left- and right-hand panels). The inserted charge  $Q_{\text{in}}$  is indicated in each panel. Data are given in Ref [2].

## References

- [1] N. Stolterfoht *et al.*, Phys. Rev. Lett. **88**, 133201 (2002)
- [2] N. Stolterfoht and Y. Yamazaki, Physics Reports **629**, 1 (2016)
- [3] I. Rajta *et al.*, Nucl. Instr. Methods B: **354**, 328 (2015)

MOLECULE-SURFACE REACTIVE SCATTERING AT LOW ENERGIES: CH<sub>4</sub>/Ir(111)

R. Moiraghi\*, A. Lozano†, H.F. Busnengo¶, and W. Dong ‡

\* Instituto de Investigaciones en Fisicoquímica de Córdoba, CONICET, Universidad Nacional de Córdoba, Haya de la Torre s/n, Córdoba, Argentina

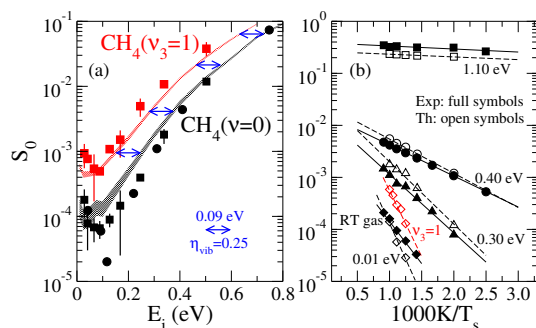
† University of Lige, Dept. of Electrical Engineering and Computer Science, Alle de la Dcouverte 10, B-4000 Lige, Belgium

¶ Grupo de Fisicoquímica en Interfases y Nanoestructuras, Instituto de Física Rosario, CONICET and Universidad Nacional de Rosario, Bv. 27 de Febrero 210 bis, 2000 Rosario, Argentina

‡ Université de Lyon, CNRS, Ecole Normale Supérieure de Lyon, Université Lyon 1, Laboratoire de Chimie, UMR 5182, 46, Allée d'Itallie, 69364 Lyon Cedex 07, France

In this work we investigate the reactive sticking of low energy methane molecules on Ir(111) by using quasi-classical trajectory (QCT) calculations based on an interaction potential parametrized by fitting of a set of Density Functional Theory (DFT) data. We analyse in particular, the interplay of two mechanisms: direct and indirect (precursor-mediated), and how this combination determines the dependence of the reactive sticking probability ( $S_0$ ) on the molecular translational impact energy,  $E_i$ , initial vibrational state of the molecule,  $\nu$ , and surface temperature,  $T_s$  (see Fig. ).

Fig. 1. (a)  $S_0(E_i)$  for initially non-rotating CH<sub>4</sub>( $\nu=0$ ) (black) and CH<sub>4</sub>( $\nu_3=1$ ) (red) impinging on Ir(111) at normal incidence for  $T_s=1000\text{K}$ . The shaded areas account for statistical errors:  $\Delta S_0=(S_0 \times (1-S_0)/N_{trajs})^{1/2}$ , being  $N_{trajs}$  the number of computed trajectories. Symbols represent experimental data: circles [1], squares [2]. (b) Arrhenius plot:  $S_0$  as a function of  $1000\text{K}/T_s$  for CH<sub>4</sub>( $\nu=0$ ) (black) and CH<sub>4</sub>( $\nu_3=1$ ) (red) at normal incidence. Open symbols: theory, full symbols: experiments taken from ref. [1]. Squares:  $E_i=1.10\text{ eV}$ , circles:  $E_i=0.40\text{ eV}$ , up triangles:  $E_i=0.30\text{ eV}$ , open diamonds:  $E_i=0.01\text{ eV}$ , full diamonds: CH<sub>4</sub> gas at room temperature.



## References

- [1] D.C. Seets, C.T. Reeves, B.A. Ferguson, M.C. Wheeler, and C.B. Mullins, *J. Chem. Phys.* **107** (1997) 10229.
- [2] E. Dombrowski, E. Peterson, D. Del Sesto, and A.L. Utz, *Catalysis Today* **244** (2015) 10.

## A TIME DEPENDENT POTENTIAL MODEL FOR CHARGE-STATE DEPENDENT STOPPING OF SLOW HIGHLY CHARGED IONS IN GRAPHENE

Pedro Luis Grande

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

Structuring of 2D materials and their heterostructures with ion beams is a challenging task, because typically low ion energies are needed to avoid damage to a substrate. In addition, at the very first monolayers of a material, ions are not yet in charge equilibrium, i.e. they may either charge up or neutralize depending on their velocity. The change in electronic structure of the ion during scattering affects the energy, which can be transferred to the recoil and therefore the energy available for defect formation.

In order to make reliable use of ion beams for defect engineering of 2D materials, we present here a model for charge state and charge exchange dependent kinetic energy transfer. Our model can be applied to all ion species, ion charge states, and energies. It is especially powerful for predicting charge state dependent stopping of slow highly charged ions.

Here we describe the model for the electronic and nuclear energy losses of slow heavy ions on graphene using the concept of the time-dependent interatomic potential [1]. The input of this model is the time-dependent number of electrons bound to the projectile, which is separated into 3 parts. The first one is the number of unchanged or frozen electrons during the collision ( $N_{\text{core}}$ ), which populate the inner-shells of the ion. The second part is the number of captured electrons ( $N_{\text{cap}}$ ) from the graphene into highly excited Rydberg states in the ion. Part of these electrons ( $N_{\text{stab}}$ ) are stabilized via Auger decay or via extremely fast ICD [1].

### References

- [1] R. A. Wilhelm and P. L. Grande, *Comm. Phys.* (2019).

## FOTOIONIZACIÓN DE ÁTOMOS Y MOLÉCULAS POR PULSOS LÁSER

Renata Della Picca

CONICET y Centro Atómico Bariloche, CNEA, Bariloche, Argentina

El entendimiento preciso de la interacción de pulsos láser cortos e intensos con la materia es necesario para el desarrollo de la ciencia de attosegundos. En particular, en el caso de la ionización de átomos y moléculas con láseres se puede ver que en el espectro del fotoelectrón hay información detallada de esta interacción, de la estructura electrónica del blanco y de las características del láser. Sin embargo esta información generalmente se encuentra codificada. Una de las principales inquietudes radica en saber cómo decodificarla y poder distinguir qué estructuras provienen del blanco y/o del láser.

En algunos casos es posible escribir la probabilidad de ionización como una factorización de dos contribuciones: una que tiene en cuenta los efectos del campo láser sobre el electrón libre y de un segundo factor que depende sólo de la estructura electrónica del blanco [1]. Sin embargo en la mayoría de los casos de interés ambas contribuciones no pueden ser analizadas independientemente dado que la información del blanco y del láser se encuentra acoplada en una forma no trivial. Por ello podemos distinguir tres escenarios dependiendo del origen de las estructuras más relevantes en el espectro electrónico: i) cuando provienen de la estructura electrónica del blanco, ii) del perfil temporal del pulso láser o iii) del acoplamiento blanco-láser.

Durante el encuentro presentaremos un ejemplo teórico para cada uno de estos escenarios. Primero, consideraremos la fotoionización de  $H_2^+$  por pulsos XUV donde una de las principales estructuras es la presencia de mínimos tipo Cooper (o bien producidos por efecto de confinamiento) [2, 3] provenientes de la interferencia tipo Young debido a la emisión coherente desde cada núcleo. En segundo lugar, presentaremos la ionización por encima del umbral (ATI) del átomo de Hidrógeno por pulsos láser de pocos ciclos (ver figura). Debido al perfil temporal dependiente del tiempo, la energía ponderomotriz  $U_P$  (promedio de la energía cinética quiver) también depende del tiempo a

través del ciclo de oscilación donde se haya realizado el promedio. Luego, aparecen estructuras alrededor de los picos ATI posicionadas a energías dadas por la regla de conservación de la energía:  $E_n = n\omega - I_P - U_P$  [5]. Finalmente, presentaremos la fotoionización asistida por láser (LAPE) de Argón donde el acoplamiento de la distribución espacial del blanco con la simetría temporal del láser dan lugar a una cancelación de algunos picos 'sideband' en el espectro.

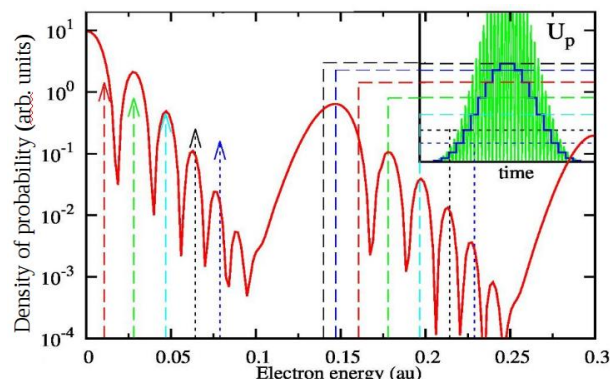


Fig. 1. Espectro ATI de H(1s) debido a un láser de 24 ciclos y con  $\omega = 0.15a.u.$

## References

- [1] Della Picca R, Fiol J and Fainstein P D *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **46** 175603 (2013).
- [2] Della Picca R, Fainstein P D, Martiarena M L, Sisourat N, Dubois A *Phys. Rev. A* **79** 032702 (2009).
- [3] Fernández *et al* *Phys. Rev. Lett.* **98** 043005 (2007).
- [4] Della Picca R, Fainstein P D, Dubois A *Phys. Rev. A* **84** 033405 (2011).
- [5] Della Picca R, Gramajo A A, Garibotti C R, López S D, Arbó D G *Phys. Rev. A* **93** 0323419 (2016).

## LOS PRESUPUESTOS FUNDAMENTALES QUE HAN REGIDO LA HISTORIA DE LA FÍSICA Y LAS CONTROVERSIAS EN TORNO A LA EXISTENCIA DE MATERIA OSCURA

Leonardo Levinas

Universidad de Buenos Aires, CONICET, Buenos Aires, Argentina

Mi objetivo es mostrar de qué manera los presupuestos fundamentales en los que se han sustentado la mayoría de las teorías físicas poseen plena vigencia, y cómo la necesidad de imponerlos condujo, muchas veces, a complicaciones insalvables obligando a operar transformaciones drásticas en los puntos de vista.

Según A. Einstein “la mayoría de las ideas fundamentales de la ciencia son esencialmente sencillas y por regla general pueden ser expresadas en un lenguaje comprensible para todos”; afirmación que confrontaremos con la del gran matemático B. Russell quien sostenía que “la filosofía consiste en empezar con algo tan simple que parezca irrelevante y en terminar con algo tan paradójico que nadie pueda creerlo”. Intentaremos mostrar de qué manera ambas sentencias fueron aplicadas a lo largo de la historia de la física. Para ello analizaremos algunos aspectos formales y técnicos significados, que revelan de qué manera el ideal de sencillez siempre ha competido con el ideal de precisión. Tomaremos como estudio de caso la cuestión referida las leyes de movimiento partiendo de los orígenes de la física y desembocando en las controversias actuales referidas a la enigmática cuestión vinculada a la materia oscura.

## CHARGE TRANSFER IN LOW-ENERGY COLLISIONS OF PROTONS WITH DIFFERENT SURFACES: STRONG SIGNALS OF THE SURFACE BAND STRUCTURE.

Vanessa Quintero<sup>1</sup>, Marcos Tacca<sup>1</sup>, Ricardo Vidal<sup>1</sup>, Fernando Bonetto<sup>1</sup>, Edith Goldberg<sup>1</sup>

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

Charge exchange process in collisions between H<sup>+</sup> projectiles and two very different surfaces: Cu(111) and a 3 monolayer of C60 grown on Cu(111), are experimentally and theoretically analyzed for a wide range of energies (2-8keV) in the low-energy regime.

Experimentally, the negative, positive and total projectile scattered fractions are determined by using the low energy ion scattering (LEIS) technique. Two different collisional setups were studied for a backscattering angle of 135°: 45°/90° and specular 67.5°/67.5° incoming/exit angles determined with respect to the target surface plane.

A first principles based theoretical model was used to describe the dynamic charge exchange processes taking place in the experimental collision situation.

Theoretical and experimental results are analyzed and compared, also in comparative terms with our previous measurements in the H<sup>+</sup>/pyrolytic graphite (HOPG) system.

A deep analysis based on the characteristic times involved in the collision process and the peculiarities of the different surface band structures allows for understanding the differences observed in the measured ion fractions, and also the limitations of our theoretical model.

## DISPERSIÓN DE IONES EN PELÍCULAS DE GERMANENO SOBRE Au(111) y Al(111)

E.D. Cantero, E.A. Martínez<sup>1</sup>, J.D. Fuhr, M.L. Martiarena, O. Grizzi y E.A. Sánchez

Centro Atómico Bariloche, CNEA. CONICET,

1) Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo, CNEA.

La posibilidad de fabricar películas 2D basadas en elementos de la columna IV diferentes al C ha despertado un considerable interés en la comunidad de “física de Superficies” por sus promisorias aplicaciones y en algunos casos por sus propiedades topológicas específicas. El principal inconveniente a sortear es que estos materiales deben ser fabricados sobre sustratos (superficies) que favorezcan su crecimiento sin afectar apreciablemente las propiedades 2D de las películas. Este desafío es encarado actualmente por muchos laboratorios proponiéndose diversos métodos de fabricación y de caracterización de las películas [1-3]. En un primer paso se necesita determinar la cristalografía y evaluar el comportamiento del sustrato, para ello se deben usar técnicas con suficiente resolución superficial como para discernir la migración de elementos de la capa 2D hacia el sustrato y lo que es aún más difícil evaluar la presencia de átomos del sustrato en la capa “monoatómica” 2D. Aquí, la técnica de dispersión de átomos en superficies puede contribuir en forma relevante ya que posee la sensibilidad superficial adecuada, es sensible al tipo de elemento y genera poco daño si se usan técnicas multicanales con detección de iones y átomos neutros. En este trabajo se muestran resultados sobre el crecimiento de películas de Ge sobre las superficies Au(111) y Al(111) y su caracterización combinando dispersión de iones con otras técnicas de análisis de superficies [LEED, XPS, UPS, STM] y cálculos DFT. En ambos casos evaluamos la formación de germaneno versus la formación de una aleación de superficie siguiendo “in situ” la evolución de las películas desde

fracciones de monocapa hasta completar varias capas atómicas [4,5]. Se discute el comportamiento de las películas con la temperatura del sustrato. Los resultados experimentales son contrastados con modelos propuestos desde cálculos DFT.

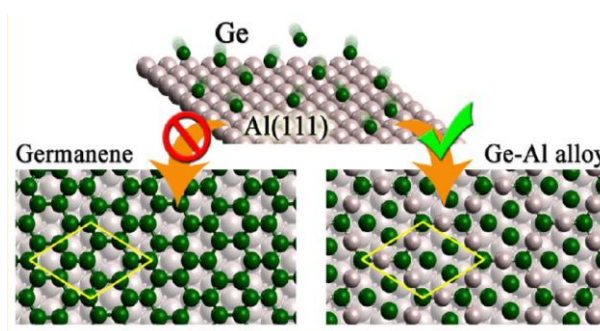


Figura 1: Esquema de dos estructuras cristalinas posibles durante el crecimiento de películas de Ge en Al(111).

### Referencias

- [1] María E. Dávila and Guy Le Lay, Scientific Reports 20714, Nature, 2016.
- [2] M. Derivaz, D. Dentel, R. Stephan, MC. Hanf, A. Mehdaoui, P. Sonnet, and C. Pirri. Nanoletters 15, 2510, 2015.
- [3] J. Fang, P. Zhao, Chen G. J. Phys. Chem. C, 122, 18669–18681, 2018.
- [4] E. D. Cantero. L. M. Solis, Yongfeng Tong, J. D. Fuhr, M. L. Martiarena, O. Grizzi, E.A. Sánchez, Phys. Chem. Chem. Phys, 19, 18580, 2017
- [5] E. A. Martínez, J. D. Fuhr, O. Grizzi, E.A. Sánchez, E. D. Cantero. J. Phys. Chem. C. 123, 12910, 2019.

## SIMULACIONES DE DINÁMICA MOLECULAR CLÁSICA INCLUYENDO EFECTOS ELECTRÓNICOS

Eduardo M. Bringa

CONICET y Universidad de Mendoza, Argentina

Las simulaciones atomísticas clásicas con dinámica molecular (molecular dynamics, MD), permiten estudiar sistemas de interés para nanotecnología, con la posibilidad de incluir millones de átomos y defectos complejos. Usualmente las interacciones entre átomos no incluyen efectos electrónicos, además de los que están incluidos de manera efectiva y muy simplificada en los potenciales empíricos de interacción. Sin embargo, gracias a los avances en hardware y software, existen numerosos intentos por incluir estos efectos.

En esta presentación se van a mostrar tres ejemplos distintos de algunos de estos esfuerzos para incluir efectos electrónicos en MD: potenciales reactivos de orden de enlace que incluyen transferencia de carga, sistemas donde los electrones se incluyen como un fluido dentro de un modelo de dos temperaturas, y sistemas que incluyen magnetismo. Respecto a sistemas reactivos, los enlaces que dependen del número de vecinos y la transferencia de carga puede modificar significativamente la respuesta mecánica del sistema. Por otro lado, el modelo de electrones como fluido dentro del “Two-Temperature Model”, acoplado a MD, “TTM-MD”, puede resultar muy útil para simular irradiación de nanomateriales con proyectiles pesados a energías de MeV, pero precisa de avances en modelado de electrones fuera del equilibrio para ajustar los parámetros necesarios. Finalmente, una alternativa para modelar sistemas magnéticos complejos es adicionar un spin “clásico” a cada átomo del sistema, lo cual permite estudiar la magnetización de sistemas finitos, y que incluyan defectos como dislocaciones. En cada caso se van a discutir limitaciones de los modelos y perspectivas de mejoras en el futuro cercano.

GIFAD FOR He/KCl(001):  
UNEXPECTED RAINBOW ANGLE INCREASE FOR LOW- $E_{\perp}$  INCIDENCE

G.A. Bocan\*, M.S. Gravielle†, H. Khemliche‡ and E.A. Sánchez\*§

\*Instituto de Nanociencia y Nanotecnología - Nodo Bariloche, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), S.C. de Bariloche, Argentina

†Instituto de Astronomía y Física del Espacio, Buenos Aires, Argentina

‡Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay, Université Paris Sud, Orsay, France

§Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA), S.C. de Bariloche, Argentina

In this contribution we will address Grazing Incidence Fast Atom Diffraction (GIFAD) [1, 2] for He/KCl(001) [3, 4], with the focus on the rainbow angle and its behaviour for low perpendicular energies  $E_{\perp}$  (associated to the  ${}^4\text{He}$  atoms motion in the plane normal to the channeling direction). In GIFAD the dynamics is ruled by the potential energy surface (PES), averaged along the channel (henceforth axial PES). The rainbow angle is the angle of maximum deflection which, within a hard corrugated wall (HCW) approach, is determined by the steepest slope of the  $E_{\perp}$  equipotential curve of the axial PES. Intuitively, upon decreasing  $E_{\perp}$  this slope should decrease, as He atoms are reflected farther from the surface. Intriguingly, experiments show the rainbow angle increases for decreasing low  $E_{\perp}$ , this increase being particularly sharp when incidence is along the  $\langle 110 \rangle$  direction (Fig. 1). Simulations, performed as explained in Ref. [4] (PBE-PES + SIVR), very well reproduce the observed feature, in marked contrast to the poor accord obtained with the HCW approach.

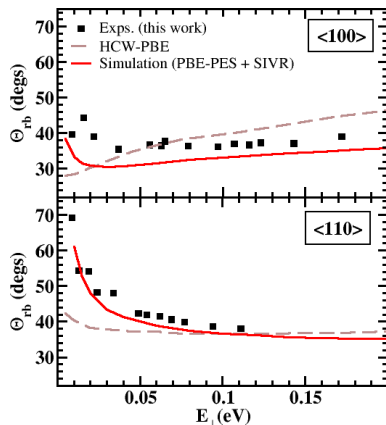


Fig. 1. Rainbow deflection angle  $\Theta_{rb}$ , as a function of the perpendicular energy  $E_{\perp}$ .

This result points to soft potential effects as the main mechanism behind the observed rainbow increase. The detailed analysis of the equipotential curves across the  $\langle 100 \rangle$  and  $\langle 110 \rangle$  channels, and the simulated trajectories that contribute to the rainbow confirms the latter conclusion (Fig. 2, with  $a = \sqrt{2}\delta = 6,381 \text{ \AA}$ ). The presence of a shallow ( $\sim 5 \text{ meV}$ ) potential well deviates the outgoing low- $E_{\perp}$  trajectories, the effect being stronger for  $\langle 110 \rangle$  given its equipotentials beyond-the-well higher corrugation.

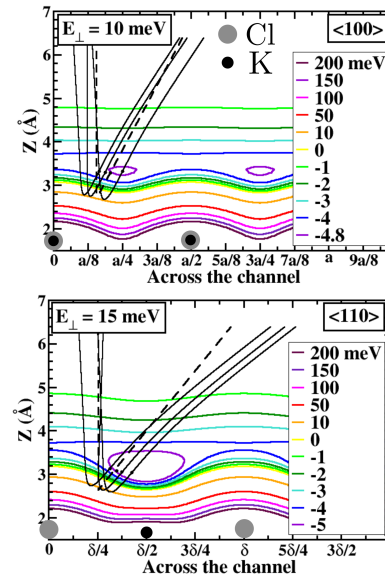


Fig. 2. Equipotential curves and rainbow trajectories. Dashed-line: HCW.

## Referencias

- [1] P. Rousseau *et al*, PRL **98**, 016104 (2007)
- [2] A. Schüller *et al*, PRL **98**, 016103 (2007)
- [3] U. Specht *et al*, NIMB **269**, 799 (2011)
- [4] G.A. Bocan *et al*, NIMB **421**, 1 (2018)

## ENTROPIÁS DE ENTRELAZAMIENTO EN SISTEMAS CONTINUOS

Pablo Serra<sup>\*,†</sup>

<sup>\*</sup>Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación, FaMAF – Universidad Nacional de Córdoba

<sup>†</sup>Instituto de Física Enrique Gaviola, IFEG – CONICET, Córdoba, Argentina

El contenido de información en sistemas cuánticos de variables continuas es usualmente estudiado utilizando una variedad de métodos aproximativos. Las aproximaciones permiten obtener el espectro, las autofunciones o la matriz densidad reducida, elementos que son esenciales para calcular cantidades, como la entropía de von Neumann, que cuantifica la información contenida en el sistema.

En esta charla se mostrarán cálculos de en-

tropías cuánticas de entrelazamiento para sistemas con grados de libertad continuos (átomos, sistemas de pocos cuerpos), se discutirá su comportamiento en un entorno del umbral del continuo, como así también para el caso de resonancias. Además, mostraremos resultados exactos en sistemas cuasi-exactamente solubles, en los que podemos obtener analíticamente el espectro de entrelazamiento en conjuntos discretos de puntos.

## IMPLEMENTACIÓN DE MÉTODOS DE APRENDIZAJE AUTOMATIZADO EN PROBLEMAS COLISIONALES

A M P Mendez\*, J I Di Filippo<sup>†</sup>, S D López\* and D M Mitnik\*<sup>†</sup>

\*Instituto de Astronomía y Física del Espacio, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas and Universidad de Buenos Aires, Buenos Aires, Argentina

<sup>†</sup>Departamento de Física, Universidad de Buenos Aires, Buenos Aires, Argentina

En el campo de la física de colisiones, existen problemas que requieren la realización de numerosas iteraciones en las que se ajustan parámetros, o en los que se hacen simulaciones bajo diferentes suposiciones iniciales. Las herramientas desarrolladas en el campo del *machine learning* resultan de gran aplicabilidad en este tipo de situaciones. En el presente reporte mostramos algunos ejemplos de dicha implementación en la física de colisiones. En particular, utilizamos herramientas de aprendizaje automatizado para describir con precisión blancos atómicos en procesos colisionales.

Los cálculos de transiciones inelásticas requieren la representación de los estados ligados y continuos involucrados. En principio, la existencia de un potencial efectivo que describa dichos estados permitiría obtener de forma directa las funciones de onda de las partículas interactuantes. Desarrollamos el método de inversión depurada (DIM) [1] para la obtención de potenciales efectivos orbitales atómicos y moleculares. El método consiste en la inversión directa de ecuaciones de tipo Kohn–Sham, cuyas soluciones están dadas por orbitales de Hartree–Fock. El potencial resultante, plagado de polos y/o divergencias, es ajustado a través de una expresión analítica paramétrica de manera tal que las energías y valores medios originales son reproducidos con gran precisión. Sin embargo, el ajuste del potencial y optimización de los parámetros es un proceso que no se puede sistematizar y resulta no sólo tedioso, sino que es prácticamente “artesanal”.

Presentamos otro ejemplo de aplicación en cálculos de colisiones de electrones con iones, utilizando el método de R–matrix [2]. En este caso es primordial realizar una descripción precisa del blanco [3, 4]. La determinación de una estructura atómica adecuada, no es un problema simple, y requiere de numerosos pasos de prue-

ba y error, hasta encontrar las configuraciones de base y los parámetros adecuados. A menudo, esta etapa del cálculo resulta la que consume mayor cantidad de tiempo y esfuerzos. En general, la función de onda del blanco se expresa mediante el método de *configuration interaction* (CI), utilizando potenciales modelo que contienen parámetros de escaleo [5]. La precisión de la estructura se puede mejorar aumentando el número de configuraciones en el CI, lo que a su vez aumenta el número de parámetros que se pueden variar. Sin embargo, no existe una prescripción sistemática ni un comportamiento analítico que permita automatizar a este procedimiento.

La inclusión de herramientas de aprendizaje automatizado constituye una mejora significativa para la solución de ambos problemas. A partir de su implementación, hemos logrado reducir drásticamente los niveles de intervención humana, mejorando incluso los resultados previos.

## Referencias

- [1] A.M.P. Mendez, D.M. Mitnik, and J.E. Miraglia, *Int. J. Quant. Chem.* **116**, 1882 (2016); *Advances in Quantum Chemistry accepted* (2019).
- [2] P.G. Burke, and K.A. Berrington, *Atomic and Molecular Processes: an R–Matrix Approach*, Springer (1993).
- [3] K. Bartschat *et al* *J. Phys. B* **37** 2617 (2004).
- [4] O. Zatsarinny *et al* *J. Phys. B* **49** 235701 (2016).
- [5] N.R. Badnell, *Comput. Phys. Commun.* **7** 1528 (2011).

## FRAGMENTAÇÃO MÚLTIPLA DE MOLÉCULAS

Eduardo C. Montenegro

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

A fragmentação de moléculas induzida por impacto de elétrons ou prótons é analisada procurando-se conectar suas duas etapas: a produção de vacâncias primárias nos vários orbitais moleculares pelo projétil e a subsequente fragmentação pós-colisional. Para isto será descrita uma metodologia para associar os fragmentos ejetados e suas taxas de produção ao orbital molecular ionizado, bem como as assinaturas dinâmicas dos processos de ionização simples e dupla nos diversos fragmentos. Na etapa de redistribuição da energia transferida pelo projétil entre elétrons e núcleos, será analisado

o papel das transições Auger e dos estados satélites, bem como o da mudança da geometria da molécula durante a fragmentação. Finalmente, a dependência da taxa de ejeção de alguns fragmentos com sinal da carga do projétil será discutida.

Estes temas serão expostos com base em experimentos realizados com moléculas de diferentes complexidades, tais como Pirimidina ( $C_4N_2H_4$ ), Tetrahydrofurano ( $C_4H_8O$ ), água e metano, e focando a discussão na ionização das camadas internas de valência.

## SOBRE CÓMO LAS INCERTEZAS CLÁSICAS DEBILITAN LA COHERENCIA CUÁNTICA

R. O. Barrachina\*†‡

\*Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica, 8400 Bariloche, Río Negro, Argentina.

† Instituto Balseiro, Comisión Nacional de Energía Atómica y Universidad Nacional de Cuyo, 8400 Bariloche, Río Negro, Argentina.

‡ Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Argentina.

¿De qué hablamos cuando hablamos de coherencia cuántica? Si confiamos en los libros de texto más conocidos, es difícil decirlo. Excepto por unas escasas excepciones, la palabra “coherencia” ni siquiera aparece en los índices alfabéticos de la gran mayoría de ellos.

En esta comunicación propondremos una definición operacional de dicho concepto [1], y discutiremos los efectos que las incertezas (de origen clásico) en la posición y el impulso inicial de los estados cuánticos pueden producir en la coherencia de un conjunto de partículas.

Además, demostraremos que estos resultados proporcionan una solución integral a una reciente controversia en la Física de Colisiones Atómicas [2, 3].

De esta manera, buscaremos brindar una respuesta “coherente” a ese tipo de preguntas que realmente valen la pena –simples en su declaración y aparentemente complejas en su expli-

cación– para las cuales, sin una base conceptual adecuada, se confronta la afasia descrita por San Agustín:

*Si nemo ex me quaerat, scio;  
si quaerenti explicare velim, nescio.*

(Si no me preguntas, lo sé;  
si me preguntas, lo ignoro).

## Referencias

- [1] I. Fabre, F. Navarrete, L. Sarkadi and R. O. Barrachina, *Eur. J. Phys.* **39**, 015401 (2018).
- [2] H. Gassert *et al.*, *Journal of Physics: Conf. Series* **875**, 092006 (2017).
- [3] M. Schulz, *Adv. Atom. Mol. Opt. Phys.* **66**, 507 (2017).

## RECOIL ION MOMENTUM SPECTROSCOPY STUDIES OF ELECTRON CAPTURE AND IONIZATION IN ION-ATOM AND ION-MOLECULE COLLISIONS

P. Focke<sup>1</sup>, M. Alessi<sup>2</sup>, N. D. Cariatore<sup>3</sup>, R. E. Olson<sup>4</sup> and S. Otranto<sup>3</sup>

1) Centro Atómico Bariloche, Av. Bustillo 9500, 8400 S. C. de Bariloche, Argentina

2) INVAP SE, Av. L. Piedrabuena 4950, 8400CPV, S. C. de Bariloche, Argentina

3) Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. L. N. Alem 1253, B8000CPB-Bahía Blanca, Argentina.

4) Physics Department, Missouri University of Science and Technology, Rolla MO 65409, USA.

In this talk, we will briefly review the electron capture and ionization processes that were studied during the last decade by means of the Cold Target Recoil Ion Momentum Spectroscopy (COLTRIMS) setup married to the 20-300kV Cockcroft-Walton accelerator at the Centro Atómico Bariloche. In particular, we will focus on the determination of state selective electron capture processes for  ${}^3\text{He}^{2+} + \text{He}$  collisions [1] and  $\text{He}^+ + \text{H}_2$  [2] collisions, and  $\text{H}^+ + \text{He}$  and  $\text{Ar}$  [3]. While these studies strongly rely in the determination of the recoil ion momentum component parallel to the beam direction, differential cross sections in the projectile scattering angle or transverse recoil ion momentum can reveal footprints of many physical processes, such as diffraction patterns or electron saddle swaps oscillations.

Limitations due to the potential liquefaction of targets such as argon, for which the use of pre-cooling stages for the target gas jet are prohibitive, are discussed. In this “not extremely cold” context, the cylindrical symmetry for the component of the recoil momentum that is transverse to the beam direction is lost, since the jet direction is thermally affected. To deal with such targets, a procedure based on the inverse Abel projection is developed to recover the expected cylindrical symmetry. Credence to this procedure is lent by its successful implementation on He target, for which the use of a pre-cooling stage is feasible.

These experimental studies are theoretically benchmarked by means of classical trajectory Monte Carlo (CTMC) simulations which have been

particularized to the different collision systems under study.

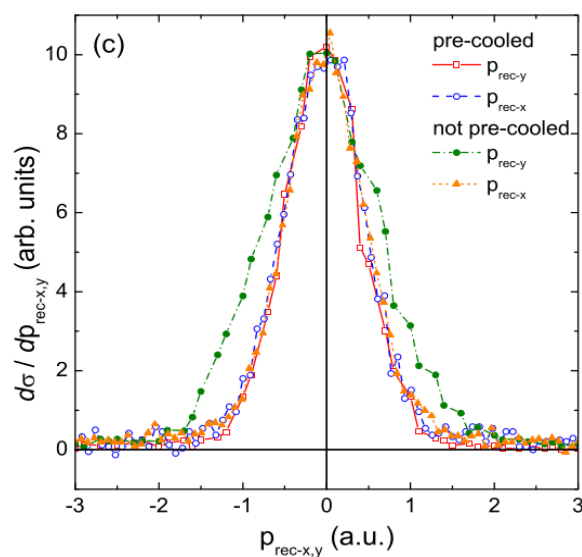


Figure 1: Transverse momentum distribution for  $\text{H}^+ + \text{He}$  collisions at 80 keV

### References

- [1] M. Alessi, S. Otranto, and P. Focke, *Phys. Rev. A* 83, 014701 (2011).
- [2] M. Alessi, N. D. Cariatore, P. Focke and S. Otranto, *Phys. Rev. A* 85, 042704 (2012).
- [3] P. Focke, R. E. Olson, N. D. Cariatore, M. Alessi and S. Otranto, *Phys. Rev. A* 95, 052707 (2017).

## AB-INITIO CALCULATIONS OF STOPPING POWER IN CRYSTALLINE SOLIDS

Alfredo A. Correa

Lawerence Livermore National Laboratory, E.E.U.U.

From the early models of electronic stopping power to the current first principles simulations, the techniques evolved to increase the range of validity and to reduce empiricism. Thanks to a combination of theoretical advances provided by Time Dependent Density Functional Theory (TDDFT) and the development of numerical codes, it became possible to predict electronic stopping power and evaluate energy losses in a variety of collision phenomena, including for realistic materials by performing direct simulations of the electron excitation processes beyond linear response, and including electronic band structure effects.

We employed real-time time-dependent density functional equation to obtain electronic stopping at low velocity for protons, alpha and heavier ions in bulk systems, metals and insulator. In this talk we present several prototypical cases where first principles techniques are fundamental to describe the electronic stopping process and give a complete description of dissipative dynamics.

# RESÚMENES DE LOS POSTERS

## MOIRÉ PATTERNS IN MOMENTUM MAPS FOR ATOMIC PHOTOIONIZATION

Martín Dran y Diego Arbó

Institute for Astronomy and Space Physics IAFE (UBA-Conicet), 1428 Buenos Aires, Argentina

We theoretically investigate on the origin of lateral ring structures in the doubly differential momentum distribution for atomic ionization by laser pulses in the midinfrared spectral region. Moiré patterns appear in a myriad of situations not only in physics and mathematics but also in diverse disciplines such as art, fashion, digital photography and television [1]. For moiré interference pattern to appear, two slightly different patterns or grids must be present.

Photoelectron spectra have been described in the literature as an interference problem in the time domain. Trajectories stemming from different optical laser cycles give rise to *intercycle* interference energy peaks known as multiphoton (or ATI) peaks. Besides, another structure comes from the *intracycle* interference of the electron trajectories born during the same optical cycle [2]. These two interference patterns form two grids with different momentum-dependent spacing.

We theoretically investigate on the origin of lateral ring structures in the doubly differential momentum distribution for atomic ionization by laser pulses in the midinfrared spectral region [3]. We demonstrate that such structures stems from the interplay between intra- and intercycle interference patterns which work as two separate grids in the two-dimensional momentum domain. When the periods of the two grids (intra- and intercycle) are similar, moiré patterns arise as concentric rings at high electron kinetic energy in the forward and backward directions [4].

In Fig. 1 (a), the doubly differential momentum distribution calculated within the saddle point approximation (SPA) is displayed. One can see the intercycle interference pattern as iso-energetic concentric rings in agreement with the conservation of energy for the absorption of multiple photons of the laser. Furthermore, the intracycle pattern is displayed as symmetrical

convex stripes with respect to the parallel momentum axis. Fig. 1 (b) shows the spacing of the two grids along the parallel momentum axis as a function of the parallel momentum. We observe that the spacing of the two intra- and intercycle grids coincide at parallel momentum  $\sim 0.85$  a.u., just at the center of the lateral ring.

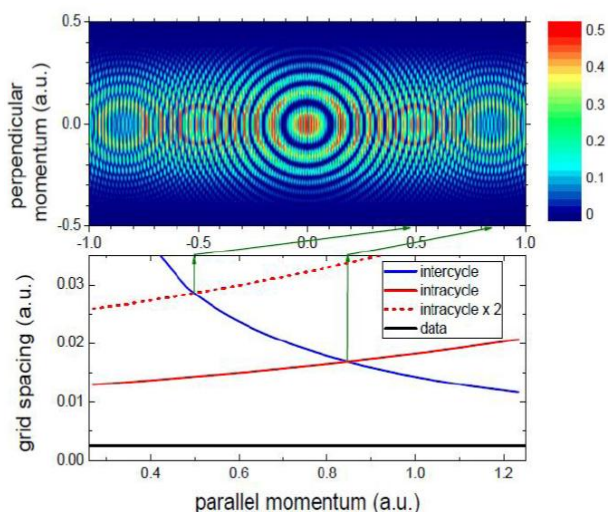


Figure 1. (a) Momentum distribution after interaction of a strong ( $I = 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup>) midinfrared ( $\lambda = 3200$  nm) laser pulse with a hydrogen atom (semiclassical model). (b) Grid spacing as a function of the parallel momentum.

## References

- [1] Miao H *et al.* 2016, Nature Physics **12**, 830
- [2] Arbó D G *et al.* 2010, Phys. Rev. A **82**, 043426; *ibid* **81**, 021403
- [3] Lemell C *et al.* 2013, Phys. Rev. A **87**, 013421
- [4] Dran M and Arbó D G 2018, Phys. Rev. A **97**, 053406

## HOLOGRAPHIC INTERFERENCE IN PHOTOELECTRON SPECTRA

S. D. López and D. G. Arbó

<sup>1</sup> Institute for Astronomy and Space Physics IAFE (UBA-Conicet), 1428 Buenos Aires, Argentina

When an intense short laser pulse interacts with an atom ionizing it, the photoelectron spectra present several structures that can be understood as double slit interferences in the time domain, namely intra- and inter-cycle interferences [1]. This type of structures is formed by electrons that emerge from the atom and follow directly to detector. There is another type of structures that requires interference of direct electron trajectories with others that interact with the parent core. In a classical picture, the rescattering trajectories return to the parent ion driven by the laser field and rescatters off to the detector. It is well known that a short range potential is sufficient to understand the rescattering rings at high energy, formed by very hard interaction among electron and ion [2]. Other structures can be explained only when long range coulomb interactions take place. This type of structures can be interpreted as holograms, i.e. the interference pattern between the direct (reference) and the rescattered (signal beam) electrons. In this way, the information of the interaction is encoded in the interference pattern between the reference and the signal [3].

In this work we present a theoretical analysis of interferences using a numerical solution of the time dependent Schrödinger equation (TDSE) and the semiclassical two step model (SCTS) [4]. We analyze the ionization of atomic hydrogen to characterize the role that the long-range Coulomb interaction plays in the holographic structures. With semiclassical approaches we can examine the trajectories that lead to different final conditions and get a deeper understanding of the electron kinematics associated to holographic structures.

We show in Fig. 1 photoelectron distributions as a function of parallel  $k_z$  and perpendicular  $k_\perp$  momentum to polarization axis calculated with the SCTS model (upper panel) and the TDSE (lower

panel). We observe interference patterns resembling a dispersion of an electron wave packet from a potential centered in the origin in both calculations.

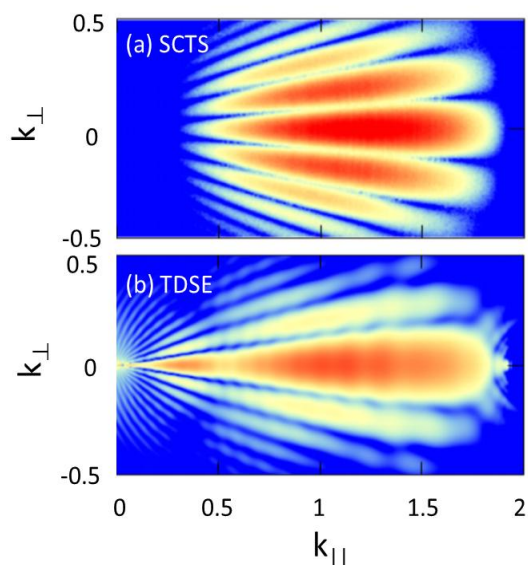


Figure 1: Momentum distribution after interaction of a near-infrared ( $\lambda = 800$  nm) one-cycle laser pulse with a hydrogen atom. (a) SCTS, (b) TDSE.  $I = 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup>.

## References

- [1] Arbó D G *et al.* 2010, Phys. Rev. A **82**, 043426; *ibid* **81**, 021403
- [2] Lewenstein, M. *et al.* 1995, Phys. Rev. A **51**, 1495.
- [3] Huismans, Y. *et al.* 2011, Science **331**, 61
- [4] Shvetsov-Shilovski, N. *et al.* 2016, Phys. Rev. A **94**, 013415.

TIME DELAYS IN ABOVE-THRESHOLD  $\omega$ - $2\omega$  IONIZATION OF ARGONS. D. López<sup>1</sup>, S. Donsa<sup>2</sup>, S. Nagele<sup>2</sup>, J. Burgdörfer<sup>2</sup>, and D. G. Arbó<sup>1</sup><sup>1</sup> Institute for Astronomy and Space Physics IAFE (UBA-Conicet), 1428 Buenos Aires, Argentina<sup>2</sup> Institute for Theoretical Physics, Vienna University of Technology, Wiedner Hauptstr. 8-10/E136, A-1040 Vienna, Austria, EU

An experiment in atomic ionization by two-color lasers by Zipp *et al.*[1] has revealed that a pump-probe scheme can be used to characterize time delays in the emission of electrons in the above-threshold ionization regime for visible frequency of the pump and its first harmonic as a probe. In this work we perform a theoretical analysis of the time delays in Ar ionization by a two-color laser [Ti:Sapphire laser (800 nm) together with the first harmonic (400 nm)] for a typical  $\omega$ - $2\omega$  configuration [2]. We perform simulations with the time dependent Schrödinger equation [3] and compare these results with the strong-field and Coulomb-Volkov approximations. We find that the strong assumption of additive time delays adopted in streaking or RABBIT techniques needs to be revisited when the atomic system is subject to  $\omega$ - $2\omega$  fields [4]. In Fig. 1 we show that time delays depend on the definition used to extract them from electron momentum distributions by considering the asymmetry in a particular direction of the electron emission or by integrating over energy around the multiphoton peaks. Besides, we also find a large discrepancy between the results predicted by the strong-field approximation and the numerical solutions of the time dependent Schrödinger equation even at the highest simulated energies. With the help of the Coulomb-Volkov approximation, we see that the contribution of the long-range potential effects is almost negligible at intermediate to high emission energies with respect to the strong field approximation. We have also compared with

*ab initio* simulations using short-range Yukawa potentials.

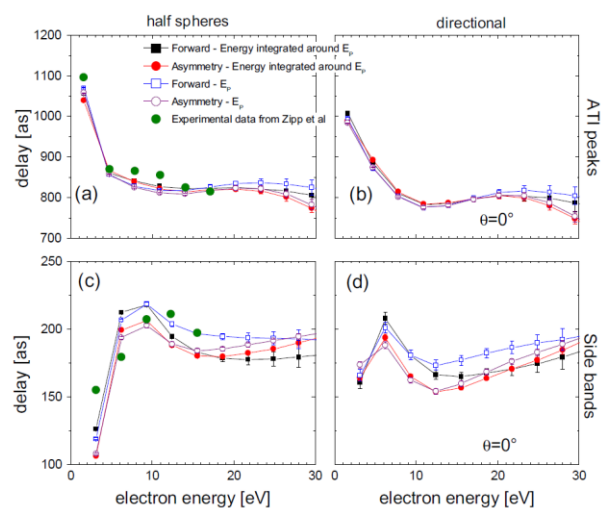


Figure 1: TDSE time delays as a function of the emission energy for ATI peaks [(a) and (b)] and sidebands [(c) and (d)] with laser intensities  $I_1=8 \times 10^{13}$  W/cm<sup>2</sup> and  $I_2=4 \times 10^{11}$  W/cm<sup>2</sup> for the respective frequencies  $\omega=0.057$  a.u. and  $2\omega$  with pulse duration  $\tau=882$  a.u. Delays were calculated for half spheres [(a) and (c)] and directionally [(b) and (d)]. Full green dots correspond to experimental data by Zipp *et al.* [1].

## References

- [1] L. J. Zipp, A. Natan, and P. H. Bucksbaum, *Optica* 1, 361-364 (2014).
- [2] D. G. Arbó, C. Lemell, S. Nagele, N. Camus, L. Fechner, A. Krupp, T. Pfeifer, S. D. López, R. Moshhammer and J. Burgdörfer *Phys. Rev. A* 92, 023402 (2015).
- [3] X.-M. Tong and S.-I. Chu, *Phys. Rev. A* 61, 031401 (2000).
- [4] R. Pazourek, S. Nagele, and J. Burgdörfer, *Rev. of Mod. Phys.* 87, 765, (2015).

## EFECTO DE ENFOQUE Y TRANSICIÓN DE DISTRIBUCIONES CUÁNTICAS A CLÁSICAS

L. Frisco<sup>1,2</sup>, J. E. Miraglia<sup>2</sup> y M. S. Gravielle<sup>2</sup>

1) Departamento de Física, FCEYN – Universidad de Buenos Aires, Buenos Aires, Argentina

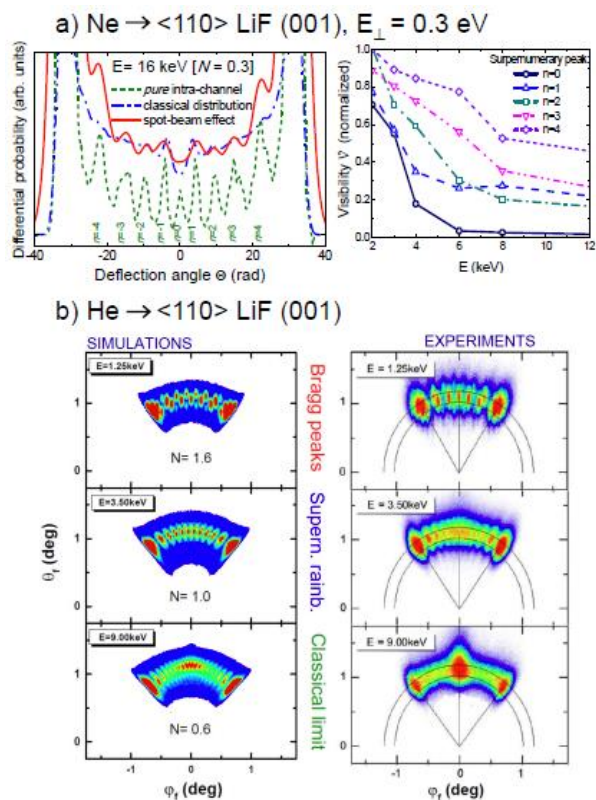
2) Instituto de Astronomía y Física del Espacio (IAFE, UBA-CONICET), Buenos Aires, Argentina

Los patrones de difracción de átomos que inciden de manera rasante sobre superficies cristalinas (GIFAD) resultan de la combinación de dos mecanismos diferenciados: la interferencia *inter*-canal, que origina los picos de Bragg, y la interferencia *intra*-canal, responsable de los *rainbow* supernumerarios. La prevalencia de uno o ambos mecanismos depende de la longitud de coherencia transversal de los proyectiles, la cual es determinada por la energía de impacto y la configuración del colimador [1]. Sin embargo, la posición relativa del punto de enfoque del haz (es decir, la posición del centro del paquete de ondas), con respecto a los sitios cristalinos, no puede controlarse experimentalmente.

En nuestro trabajo [2] hemos estudiado la influencia del efecto de enfoque del haz atómico (*spot-beam effect*), asociado a los diferentes puntos de enfoque de las partículas incidentes, sobre las estructuras de interferencia de los espectros GIFAD. Analizando los patrones de interferencia en términos del número  $N$  de canales coherentemente iluminados, pudimos determinar que cuando varios de ellos son iluminados de manera coherente, el efecto de *spot-beam* no afecta de manera significativa los patrones de GIFAD. Por el contrario, cuando la longitud de coherencia transversal del haz atómico es menor que el ancho del canal, el punto de enfoque permite explorar diferentes regiones del potencial átomo-superficie dentro del canal.

En particular, cuando la región iluminada coherentemente es pequeña, el efecto de *spot-beam* introduce una contribución decoherente de fondo, lo que reduce la visibilidad de los patrones de interferencia. De esta manera, se observó que variando la energía de incidencia  $E$ , pero manteniendo las mismas condiciones de

colimación, es posible cambiar gradualmente la distribución de los proyectiles, pasando de una distribución con interferencias cuánticas a una distribución clásica.



**Figure 1.** a) Espectro de Ne (izq.) y visibilidad (der.); b) Distribuciones angulares para He.

## Referencias

- [1] Gravielle M S *et al* 2015 *Phys. Rev. A* **92**; 2017 *J. Phys.: Conf. Ser.* **875** 012006  
 [2] Frisco L *et al* 2018 *J. Phys. : Condens. Matter* **30** 405001

FULLY DIFFERENTIAL STUDY OF THE IONIZATION OF H<sub>2</sub>O BY LIGHT PARTICLE-IMPACTEmiliano Acebal<sup>1</sup>, Sebastian Otranto<sup>1</sup>

1) Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. L. N. Alem 1253, B8000CPB-Bahía Blanca, Argentina.

The ionization of atoms and molecules by charged particles impact has been subject of many studies during the past decades. Understanding the dynamics of these processes is essential in areas such as plasma physics, astrophysics and radiobiology. In this context, the ionization of the water molecule (H<sub>2</sub>O) has acquired great interest because of its vast presence in nature, and in particular, since it can be used as a prototype for a biological medium.

A complete kinematically study of these processes can be achieved through the analysis of the fully differential cross sections (FDCS). In this sense, measurements of single ionization from the two most outer valence orbitals of H<sub>2</sub>O by electron-impact at 81 eV have recently been reported [1]. These results were accompanied by DWBA calculations and the authors concluded that higher-order terms in their theory might be relevant at this impact energy based on the discrepancies observed with the experimental data. Following this line, in a previous work, we used the CDW-EIS model to analyse those data [2], since it explicitly contains higher-order terms in the initial-state correlation. We improved indeed the agreement with measurements, compared to the DWBA.

In this work, we focus ourselves on the influence of the projectile charge sign in the single ionization of the two most outer valence orbitals of H<sub>2</sub>O. We computed FDCS by means of the CDW-EIS model [3]. This involved the calculation of the transition amplitude by a 6D integration, which was accomplished by an adaptive Monte Carlo scheme. A proper average procedure over molecular orientations was performed to mimic experimental conditions.

In Figure 1, we contrast positron- and electron-impact FDCS for one of the four kinematic conditions reported for the scattering plane. We observe a decrease of the recoil lobe and an increase of the binary region accompanied by a shift towards lower emission angles for

positron-impact. There is also a third peak among the direction of  $k_1$ , which obeys to the post-collisional interaction (PCI), just as the previous features mentioned. The same situation stands for the four kinematic conditions reported. FDCS for the denominated semi-perpendicular and full perpendicular planes are also analysed.

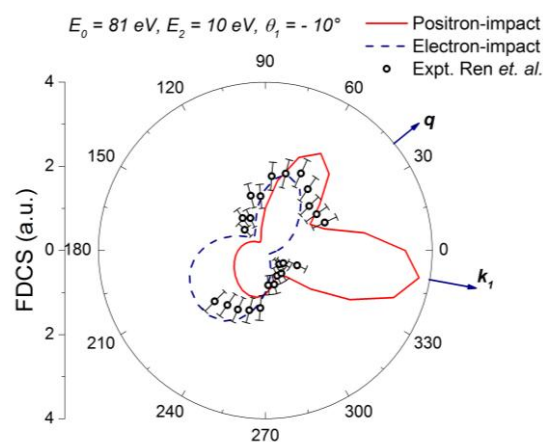


Figure 1: Fully differential cross sections for positron- (solid line) and electron- (dashed line) impact ionization of H<sub>2</sub>O, for the scattering plane  $xz$ . Experimental data for electron-impact from Ref. [1] scaled to the present theoretical results.

In addition, forward electron emission is investigated identifying the electron capture to the continuum structure for positron-impact. We respectively observe a high narrow peak and a huge dip for positron- and electron-impact due to the PCI. These structures were already seen in previous ionization studies.

### References

- [1] X. Ren, S. Amami, K. Hossen, E. Ali, C. G. Ning, J. Colgan, D. Madison, and A. Dorn, *Phys. Rev. A* **95**, 022701 (2017).
- [2] E. Acebal and S. Otranto, *Phys. Rev. A* **98**, 012703 (2018).
- [3] E. Acebal and S. Otranto, *Eur. Phys. J. D* **73**, 91 (2019).

## CROSS SECTIONS SCALING LAW FOR H<sub>2</sub>O IONIZATION BY HIGHLY-CHARGED IONS

S. Otranto<sup>1</sup>, N. Bachi<sup>1</sup>, R. E. Olson<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. L. N. Alem 1253, B8000CPB-Baha Blanca, Argentina.

<sup>2</sup>Physics Department, Missouri University of Science and Technology, Rolla MO 65409, USA.

Radiotherapy by ion beams, in contrast to photon-beam and electron-beam therapy, allows the irradiation of deep seated tumors with minimal irradiation of surrounding organs and healthy tissue. This is mainly due to the fact that ions deposit most of the dose just before they stop. The potential interest in this type of therapy has increased in recent years at such a pace that by the year 2021 the number of operational facilities worldwide are expected to double those available in 2016 [1].

Ion-therapy can be considered a multiscale process, where the collision processes cover the first stage. During these collisions, secondary electrons and free radicals are generated which are responsible for most of the biological damage to the tumoral cells. Hence, an accurate description of the main physical mechanisms leading to electron production is desirable, specially during the planning stage of the irradiation procedure which strongly relies on a numerical simulation that uses collisional cross sections as input data.

In this work we present results of classical Monte Carlo simulations (CTMC) for H<sup>+</sup>, He<sup>2+</sup>, C<sup>6+</sup>, O<sup>8+</sup> and Si<sup>13+</sup> collisions with H<sub>2</sub>O. The impact energies range from 100 to 1000 keV/amu. The molecular target is modeled by an independent atom picture, where the ten electrons are explicitly considered. The interactions among a molecular center and one electron is represented by Coulomb potential with an effective charge  $Z_{\text{eff}} = \sqrt{2|E_i|n^2}$ , where  $|E_i|$  is the ionization potential of the molecular orbital considered. The electron-electron correlation is not accounted here due to the classical instability of the multielectronic target.

The present results are compared with experimental data collected during the last four decades by several laboratories and with theoretical calculations performed by distorted wave methods [2].

Fig. 1 shows the obtained scaling for the total net cross sections ( $\sigma_{\text{net}} = \sigma_{1\text{-ion}} + 2\sigma_{2\text{-ion}} + 3\sigma_{3\text{-ion}} + \dots$ ) as a function of the impact energy. Additionally we present the scaling reported for total loss cross sections ( $\sigma_{\text{loss}} = \sigma_{1\text{-ion}} + \sigma_{2\text{-ion}} + \sigma_{3\text{-ion}} + \dots$ ) for H(1s) target which has a similar ionization potential [3].

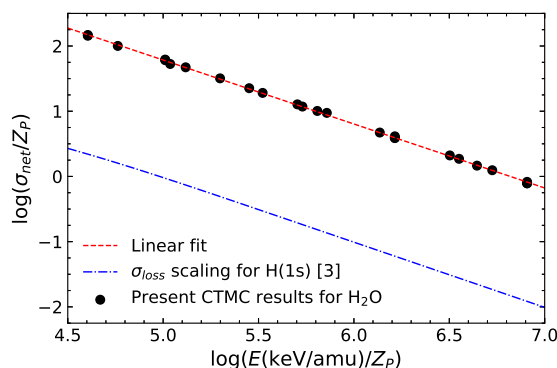


Fig. 1. Linear fit of the CTMC data for  $\log(\sigma_{\text{net}}/Z_P)$  as function of  $\log(E/Z_P)$

### References

- [1] M. Dosanjh, Cern Courier **58**, 32 (2018).
- [2] S. Bhattacharjee et al, Phys. Rev. A **96**, 052707 (2017).
- [3] R. E. Olson et al, Phys. Rev. Lett. **41**, 163 (1978).
- [4] S. Otranto, N. Bachi and R. E. Olson, Eur. Phys. J. D **73**, 41 (2019).

## EFECTO DE LAS VIBRACIONES TÉRMICAS SOBRE LOS PATRONES DE INTERFERENCIA DE ÁTOMOS RÁPIDOS DISPERSADOS DESDE SUPERFICIES CRISTALINAS

M.S. Gravielle

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

La observación de estructuras de interferencia en la distribución de átomos rápidos dispersados en forma rasante desde superficies cristalinas (*Grazing Incidence Fast Atom Diffraction* o GIFAD) depende en gran medida de las condiciones de coherencia. Sin embargo, la decoherencia introducida por las vibraciones térmicas de la red cristalina o por los procesos inelásticos, como las excitaciones de fonones, ha sido poco estudiada hasta el presente [1], y la mayoría de los modelos teóricos consideran una superficie cristalina ideal y estática, con los átomos del cristal en reposo en sus posiciones de equilibrio.

En este trabajo estudiamos el efecto de las vibraciones térmicas y de las excitaciones de fonones sobre las distribuciones de proyectiles producidas por GIFAD. Para describir las colisiones atómicas con un cristal realista, que permita las excitaciones de fonones, desarrollamos un método semi-cuántico denominado *Phonon - Surface Initial Value Representation* (P-SIVR), el cual se basa en la aproximación *Surface Initial Value Representation* (SIVR) [2] para un cristal estático.

Dentro del método P-SIVR, la superficie se representa con un modelo cuántico de cristal armónico, donde los estados cristalinos iniciales están determinados por una distribución de Maxwell-Boltzmann. Luego de sumar las contribuciones provenientes de los diferentes estados finales del cristal, la probabilidad diferencial de dispersión puede ser expandida en términos del número de fonones absorbidos o emitidos, dando lugar a probabilidades parciales,  $P_n$ -SIVR, correspondientes al intercambio de  $n$  fonones.

La aproximación  $P_n$ -SIVR para  $n = 0$  es aplicada para investigar la influencia de las vibraciones térmicas sobre los patrones de GIFAD de átomos de Ne dispersados por una superficie LiF (001) a temperatura ambiente. En la Fig.1 la distribución  $P_0$ -SIVR asociada a la colisión elástica es comparada con los resultados derivados con la aproximación SIVR, sin la inclusión de vibraciones térmicas. Se observa que incluso a temperatura ambiente, las fluctuaciones térmicas afectan los espectros angulares, introduciendo una amplia dispersión en el ángulo polar final de los proyectiles, en buen acuerdo con datos experimentales disponibles.

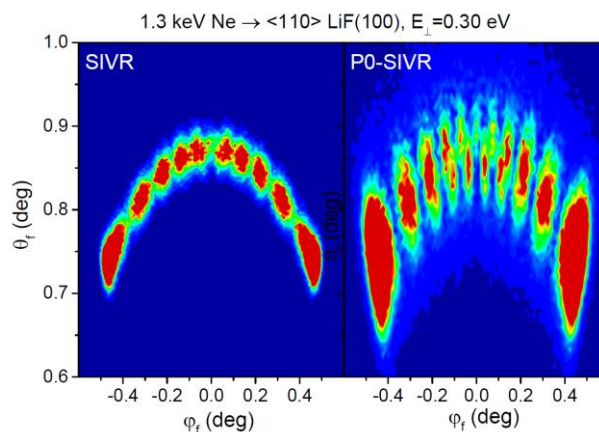


Figura 1: Distribuciones angulares con ( $P_0$ -SIVR) y sin (SIVR) vibraciones térmicas.

### References

- [1] P. Roncin *et al*, Phys. Rev. B **96**, 035415 (2017).
- [2] M.S. Gravielle *et al*, Phys. Rev. A **90**, 052718 (2014).

## Theoretical models of energy loss moments for solid targets bombarded by protons and correlated protons

C. D. Archubi<sup>1</sup> and N. R. Arista<sup>2</sup>

1) CONICET-IAFE (Comisión Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas-Instituto de Astronomía y Física del Espacio), UBA (Universidad de Buenos Aires)

2) CONEA (Comisión Nacional de Energía Atómica), CAB (Centro Atómico Bariloche)

Most of the theoretical descriptions of the vicinage effect have been made using the dielectric formulation. This is a natural way to represent the electro-dynamical interactions in a dense medium and is particularly useful to consider the interaction with conduction or valence band electrons. An interesting dielectric model developed in the nineties by Kaneko [1] extends the possibilities of the dielectric approach to evaluate the contributions of inner shells, opening in this way the possibility of more comprehensive stopping power calculations. The so called wave-packet model (WPM) of Kaneko, based on the use of gaussian distributions of electrons in momentum space, provides a significant advantage in terms of analyticity as it yields closed analytical expressions for the dielectric function, with similar properties to those of the Lindhard dielectric model (LDM) corresponding to a free-electron gas, but using more appropriate velocity distributions for each atomic shell.

Our EWPM introduces modifications to the WPM originally proposed by Kaneko, using the Levine and Louie technique [2,3] to take into account the energy gaps corresponding to the different atomic levels of the target.

On the other hand we extend the classical electro-dynamics atomic-oscillator model of Bohr to a semiclassical impact parameter model (SIPM) for the case of correlated ions. To perform this extension we consider short-distance corrections and screening effects. This approach permits us to evaluate the role of close and distant collisions on the vicinage effect, showing the growing importance of distant collisions with increasing energies.

We have performed specific calculations of vicinage effects in energy losses and inner-shell

ionization for various accessible targets (C, Al, Si, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and SiO<sub>2</sub>), and compared the calculations with existing experimental results.

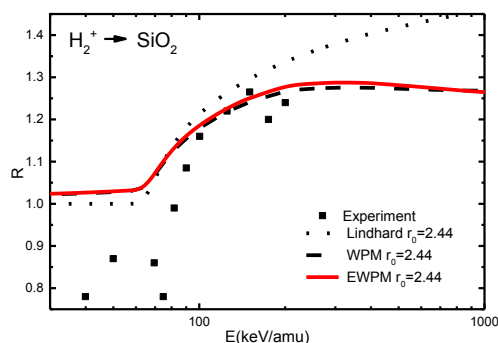


Figure 1: Lindhard electron gas and total contribution to the stopping ratio of H<sub>2</sub><sup>+</sup> projectiles traversing a SiO<sub>2</sub> target as a function of the projectile energy for a typical internuclear distance r<sub>0</sub>.

Inner-shell excitations produce an additional decrease in the vicinage effect. The present work strongly suggests new experiments at intermediate and higher energies to test our new theoretical predictions and to reveal differences between models.

### References

- [1] Kaneko T 1995 *Phys Rev A* **51** 535
- [2] Levine Z H and Louie S G 1982 *Phys Rev B* **25** 6310
- [3] Archubi C D and Arista N R 2017 *Phys Rev A* **96** 062701

## IONIZACIÓN DE LA CAPA L DE BLANCOS SÓLIDOS:

TA (Z=73), W (Z=74), PT (Z=78), AU (Z=79), PB (Z=82), BI (Z=83), TH (Z=90), U (Z=92)

Alejandra Mendez, Claudia Montanari, Darío Mitnik

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

A través del formalismo *shellwise local plasma approximation* (SLPA) [1] y de cálculos relativistas para átomos muy pesados, hemos calculado secciones eficaces de ionización de la capa L por impacto de iones de Si. Estos cálculos tienen como paso previo la obtención de las funciones de onda y energías del estado fundamental tras resolver la ecuación relativista de Dirac. Para este fin, usamos el paquete de código HULLAC [2]. Las energías son obtenidas utilizando el código RELAC [3]. Estos resultados fueron testeados con los nuevos datos del grupo de Tapan Nandi, de India con quienes estamos colaborando [4].

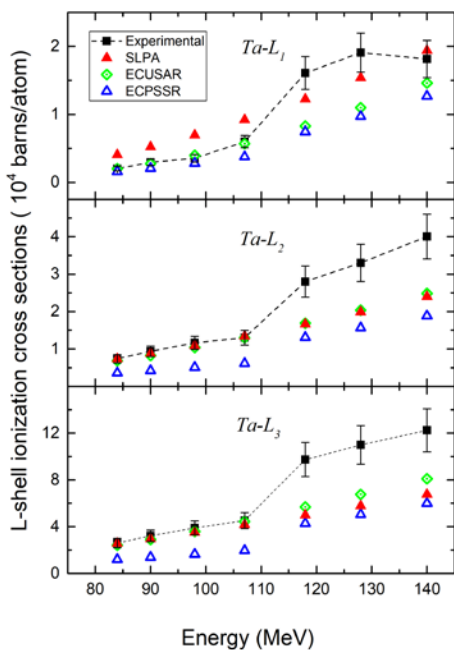


Figure 1: Ionización de la capa L de Tantalio.

Las mediciones experimentales de producción de rayos X fueron llevadas a cabo en el en el acelerador 15 UD Pelletron de la *Inter-University Accelerator Centre*, de New Delhi. También comparamos con el modelo ECPSSR y ECUSAR [5].

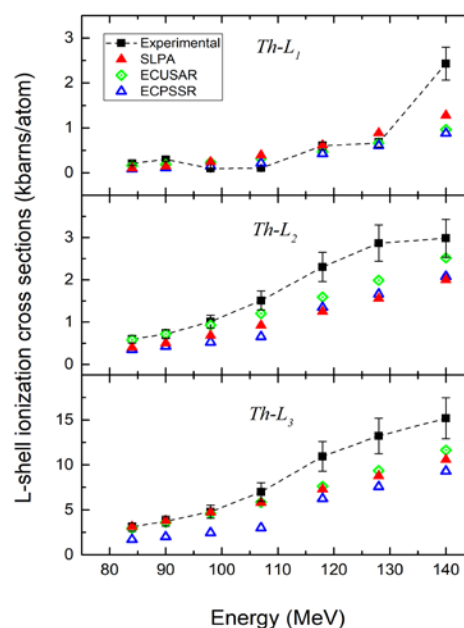


Figure 2: Ionización de la capa L de Thorio. Curvas teóricas y resultados experimentales señalados en la figura.

## Referencias

- [1] Montanari et al Phys. Rev. A 80, 012901 (2009)
- [2] Bar-Shalom et al, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 71, 169 (2001)
- [3] Klapisch, Comput. Phys. Commun. 2, 239 (1971).
- [4] M. Oswal et al, Nucl. Instr. Meth. B 416, 110 (2018)
- [5] Brandt and Lapicki, Phys. Rev. A. 23, 1717, (1981)

## PÉRDIDA DE ENERGÍA DE IONES EN SOLIDOS Y EL COLAPSO DE LA CAPA 4F

Alejandra Mendez, Claudia Montanari, Darío Mitnik, Jorge Miraglia

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

La pérdida de energía o *stopping power* de iones en materiales es un tema interesante por sus múltiples aplicaciones (desde implantación iónica a tratamiento de cáncer por protones), pero además porque pone en juego nuestro conocimiento de física básica. En el rango de energías muy bajas domina el stopping nuclear, para unos pocos keV ya la pérdida de energía del ion implica excitaciones de los electrones del blanco: primero de las capas de valencia (el gas de electrones libres de metales, excitaciones binarias y colectivas) y a mayores energías excitación de electrones internos.

En este trabajo presentamos resultados para protones en lantánidos. Estos blancos incluyen electrones de la capa 4f y requieren la solución de la ecuación relativista de Dirac para describir sus funciones de onda y energías de ligadura. Combinamos nuestra experiencia en el trabajo con los códigos HULLAC y RELAC [1-3], con los desarrollos recientes en el tema de *stopping power* [4] utilizando un modelo no perturbativo binario para la interacción con el gas de electrones libres a bajas energías, y el formalismo dieléctrico (no binario) para energías intermedias y altas, región donde las excitaciones de plasmones y las contribuciones de capas internas son importantes.

Nuestros resultados para blancos Ta [ $Z=73$ ,  $\{Xe\} + 4f(14), 6s(2), 5d(3)$ ] y Gd [ $Z=64$ ,  $\{Xe\} + 4f(7), 6s(2), 5d(1)$ ] muestran muy buen acuerdo con experimentos recientes a bajas energías, si consideramos a la capa 4f de electrones como parte del gas de electrones libres (figura 1). Sin embargo, para energías no tan bajas esta suposición sobreestima el stopping y solo los electrones 6s y 5d responderían como gas de electrones libres (figura 2).

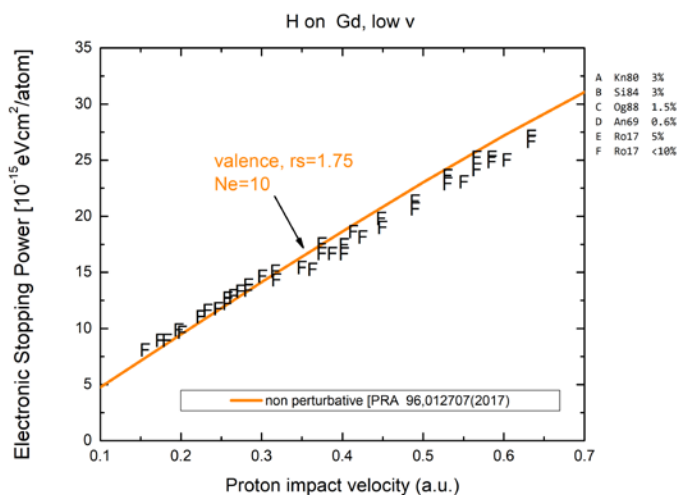


Figura 1: Pérdida de energía de protones en Gd

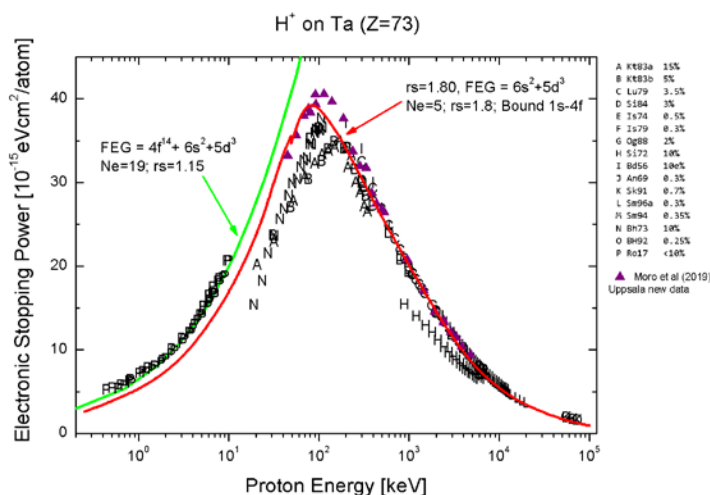


Figura 2: Pérdida de energía de protones en Ta

## Referencias

- [1] Montanari et al Phys. Rev. A 80, 012901 (2009)
- [2] Bar-Shalom et al, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 71, 169 (2001)
- [3] Klapisch, Comput. Phys. Commun. 2, 239 (1971).
- [4] Montanari & Miraglia, Phys. Rev. A. 96, 012707, (2017); Nucl. Instr. Meth. B (2019) en prensa.

## OPTICAL TOMOGRAPHY TREATED WITH THE FOURIER–CONTINUATION METHOD

E.L. Gaggioli<sup>a,b</sup>, O.P. Bruno<sup>c</sup> and D.M. Mitnik<sup>a,b</sup><sup>a</sup>Instituto de Astronomía y Física del Espacio (IAFE, CONICET–UBA), Casilla de Correo 67 – Suc. 28 Buenos Aires, (C1428ZAA), Argentina<sup>b</sup>FCEyN, Universidad de Buenos Aires, Argentina<sup>c</sup>Computing and Mathematical Sciences, Caltech, Pasadena, CA 91125, USA

Recently [1], we presented a method for the treatment of the time dependent radiative transfer equation (RTE) under the discrete ordinate approximation. The novelty of the proposed approach stems, in part, from the incorporation of a spectral method for the calculation of the spatial differential operators based on the Fourier Continuation procedure introduced by Bruno and co–authors [2]. This is a spatially dispersionless and high order method, which can handle arbitrary geometries, including those encountered in the forward model of light transport in optical tomography. The method makes it possible to calculate the time of flight of photons in random media efficiently and with high accuracy.

The governing RTE is the linearized Boltzmann equation, which is formulated in phase space. It models the transport of particles which interact mainly with a background media, and do not interact with each other. It comprises a multidimensional problem involving both the position and the velocity domains, in addition to time. In the present work we employ the Discrete Ordinates Method (DOM), in which the velocity component is decomposed into a set of discrete directions representing the propagation directions of the rays. For the treatment of the spatial differential operator, a novel spectral technique, the Fourier Continuation (Gram) method, is used. This approach utilizes an analytical method to continue any given function into a periodic function in an enlarged domain of definition. Hence, Fourier transforms can be employed for the differential operators, thus achieving spatial high order and very small amounts of artificial spatial dispersion.

We validate our theoretical results by comparison with analytic and experimental outcomes of the fluence measurements on tissue–like phantoms. Our calculations show an excellent agreement with the experimental detector

readings reported by Klose *et al.* [3].

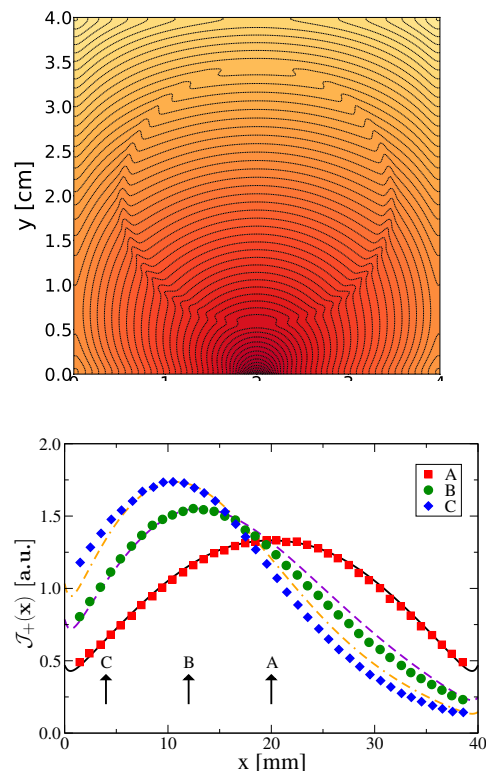


Fig. 1. Top: Photon scalar flux simulated by the FC–DOM method [1], for the experiments reported by Klose *et al.* [3]. Bottom: Comparisons between simulated and experimental fluences.

## References

- [1] E. L. Gaggioli, O. P. Bruno and D. Mitnik, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, **236**, 106589 (2019).
- [2] N. Albin and O. P. Bruno, *J. Comp. Phys.*, **230**, 6248–6270, (2011).
- [3] A. D. Klose, U. Netz, J. Beuthan, and A. H. Hielscher, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, **72**, 691–713 (2002).

## MÉTODOS DE APRENDIZAJE AUTOMÁTICO PARA LA OBTENCIÓN DE POTENCIALES EFECTIVOS

Di Filippo Juan Ignacio\*<sup>†</sup>, Mitnik Darío\*<sup>†</sup>, López Sebastián<sup>†</sup>, Mendez Alejandra<sup>†</sup>

\*Departamento de Física, FCEyN – Universidad de Buenos Aires, Buenos Aires, Argentina

<sup>†</sup>Instituto de Astronomía y Física del Espacio, Buenos Aires, Argentina

El objetivo de este trabajo consiste en la incorporación de técnicas de aprendizaje automático (*Machine Learning*, ML) a la física atómica.

Estudiamos, en primer lugar, el funcionamiento de redes neuronales y su aplicación para resolver la ecuación de Schrödinger unidimensional. Ilustramos las predicciones de la red, analizamos sus etapas de aprendizaje, y la factibilidad de emplear redes neuronales en problemas de optimización de parámetros.

Investigamos además, ciertas técnicas de optimización, tales como los procesos Gaussianos, que no constituyen estrictamente una técnica de aprendizaje automático en sí mismas, pero son ampliamente utilizadas en este campo.

Finalmente, hemos desarrollado un algoritmo propio (algoritmo genético), del cual exponemos tanto los principios de su funcionamiento como los excelentes resultados obtenidos.

Como aplicación principal, nos centramos en la optimización del método de inversión depurada (DIM) [1, 2, 3], desarrollado por nuestro grupo en años recientes. Dicho método describe átomos y moléculas mediante potenciales efectivos radiales unidimensionales y locales, que se obtienen por inversión, es decir, partiendo de sus

soluciones. A esta inversión le sigue la depuración, que consiste en la parametrización de los potenciales que asegure que tanto las energías, como los radios medios y las funciones de onda coincidan con los valores originales. Dicho proceso requiere un arduo trabajo manual. Este es justamente el tipo de problemas donde mejor se aplican las técnicas de aprendizaje automático.

## Referencias

- [1] A.M.P. Mendez, “*Método de Inversión Depurada para Potenciales Locales en Átomos y Moléculas*”, Tesis de Licenciatura, Universidad Nacional de Salta (2015).
- [2] A.M.P. Mendez, D.M. Mitnik, and J.E. Miraglia, “*Depurated inversion method for orbital-specific exchange potentials*”, *Int. J. Quantum. Chem.* **116**, 1882 (2016).
- [3] A.M.P. Mendez, D.M. Mitnik, and J.E. Miraglia, in “*Novel Electronic Structure Theory: General Innovations and Strongly Correlated Systems*”, Serial Title: *Advances in Quantum Chemistry*, Vol. **76**, p. 117–131 (2018)

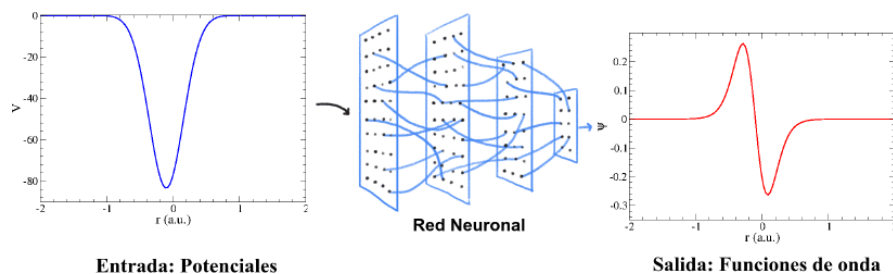


Figura 1: Red neuronal para resolver la ecuación de Schrödinger 1-D.

# LISTA DE PARTICIPANTES

	<b>Apellido</b>	<b>Nombres</b>	<b>Afiliación</b>	<b>e-mail</b>
1	Acebal	Emiliano	Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET	<a href="mailto:emi_acebal@hotmail.com">emi_acebal@hotmail.com</a>
2	Aguiar	Julio	Autoridad Regulatoria Nuclear, Buenos Aires	<a href="mailto:jaguiar@arn.gob.ar">jaguiar@arn.gob.ar</a>
3	Amado	Valeria	Autoridad Regulatoria Nuclear, Buenos Aires	<a href="mailto:vamado@arn.gob.ar">vamado@arn.gob.ar</a>
4	Arbó	Diego	Instituto de Astronomía y Física del Espacio, Buenos Aires	<a href="mailto:diego@iafe.uba.ar">diego@iafe.uba.ar</a>
5	Archubi	Claudio	Instituto de Astronomía y Física del Espacio, Buenos Aires	<a href="mailto:archubi@iafe.uba.ar">archubi@iafe.uba.ar</a>
6	Barrachina	Raúl	Comisión Nacional de Energía Atómica	<a href="mailto:raul.barrachina@gmail.com">raul.barrachina@gmail.com</a>
7	Bachi	Nicolás	Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca	<a href="mailto:nicob0601@gmail.com">nicob0601@gmail.com</a>
8	Bocan	Gisela	Instituto de Nanociencia y Nanotecnología – Nodo Bariloche	<a href="mailto:gbocan@gmail.com">gbocan@gmail.com</a>
9	Bringa	Eduardo	CONICET, Universidad de Mendoza	<a href="mailto:ebringa@yahoo.com">ebringa@yahoo.com</a>
10	Busnengo	Fabio	Instituto de Física Rosario (IFIR), (CONICET-UNR)	<a href="mailto:busnengo@ifir-conicet.gov.ar">busnengo@ifir-conicet.gov.ar</a>
11	Colavecchia	Flavio	Centro Atómico Bariloche, Argentina	<a href="mailto:flavioc@cab.cnea.gov.ar">flavioc@cab.cnea.gov.ar</a>
12	Correa	Alfredo	Lawrence Livermore National Laboratory	<a href="mailto:correa@llnl.gov">correa@llnl.gov</a>
13	Della Picca	Renata	CONICET y Centro Atómico Bariloche	<a href="mailto:renata.dellapicca@gmail.com">renata.dellapicca@gmail.com</a>
14	Di Filippo	Juan	Instituto de Astronomía y Física del Espacio, Buenos Aires	<a href="mailto:jjdifilippo@gmail.com">jjdifilippo@gmail.com</a>
15	Fainstein	Pablo	Centro Atómico Bariloche	<a href="mailto:pablof@cab.cnea.gov.ar">pablof@cab.cnea.gov.ar</a>
16	Ferrón	Julio	Instituto de Física del Litoral (CONICET-UNL)	<a href="mailto:julio.ferron@ifis.santafe-conicet.gov.ar">julio.ferron@ifis.santafe-conicet.gov.ar</a>
17	Fiol	Juan	Centro Atómico Bariloche	<a href="mailto:fiol@cab.cnea.gov.ar">fiol@cab.cnea.gov.ar</a>
18	Fojón	Omar	Instituto de Física de Rosario	<a href="mailto:ofojon@fceia.unr.edu.ar">ofojon@fceia.unr.edu.ar</a>
19	Frisco	Leandro	Instituto de Astronomía y Física del Espacio, Buenos Aires	<a href="mailto:lfrisco@iafe.uba.ar">lfrisco@iafe.uba.ar</a>
20	Fucks	Johanna	Dto. De Física, FCEN, UBA	<a href="mailto:johannafuks@df.uba.ar">johannafuks@df.uba.ar</a>
21	Gasaneo	Gustavo	Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca	<a href="mailto:ggasaneo@criba.edu.ar">ggasaneo@criba.edu.ar</a>
22	Gaggioli	Enzo	Instituto de Astronomía y Física del Espacio, Buenos Aires	<a href="mailto:egaggioli@iafe.uba.ar">egaggioli@iafe.uba.ar</a>
23	Garibotti	Roberto	Centro Atómico Bariloche, Argentina	<a href="mailto:gari@cab.cnea.gov.ar">gari@cab.cnea.gov.ar</a>
24	Goldberg	Edith	Instituto de Física del Litoral (CONICET-UNL)	<a href="mailto:edith.goldberg@santafe-conicet.gov.ar">edith.goldberg@santafe-conicet.gov.ar</a>
25	Grande	Pedro	Laboratório de Implantação Iônica, Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil	<a href="mailto:grande@if.ufrgs.br">grande@if.ufrgs.br</a>
26	Gravielle	María Silvia	Instituto de Astronomía y Física del Espacio, Buenos Aires, Argentina	<a href="mailto:msilvia@iafe.uba.ar">msilvia@iafe.uba.ar</a>
27	Grizzi	Oscar	Centro Atómico Bariloche, Instituto Balseiro. CNEA	<a href="mailto:grizzi@cab.cnea.gov.ar">grizzi@cab.cnea.gov.ar</a>
28	Levinas	Leonardo	UBA-CONICET	<a href="mailto:leolevinas@gmail.com">leolevinas@gmail.com</a>

29	Martínez	Alejandra	Instituto de Física Rosario (IFIR), (CONICET-UNR)	<a href="mailto:martinez@ifir-conicet.gov.ar">martinez@ifir-conicet.gov.ar</a>
30	Martínez	Sergio	Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca	<a href="mailto:sergmartinez@gmail.com">sergmartinez@gmail.com</a>
31	Méndez	Alejandra	Instituto de Astronomía y Física del Espacio, Buenos Aires	<a href="mailto:alemendez@iafe.uba.ar">alemendez@iafe.uba.ar</a>
32	Miraglia	Jorge	Instituto de Astronomía y Física del Espacio, Buenos Aires, Argentina	<a href="mailto:miraglia@iafe.uba.ar">miraglia@iafe.uba.ar</a>
33	Mitnik	Darío	Instituto de Astronomía y Física del Espacio, Buenos Aires, Argentina	<a href="mailto:mitnik@iafe.uba.ar">mitnik@iafe.uba.ar</a>
34	Montanari	Claudia	Instituto de Astronomía y Física del Espacio, Buenos Aires, Argentina	<a href="mailto:mclaudia@iafe.uba.ar">mclaudia@iafe.uba.ar</a>
35	Montenegro	Eduardo C.	Universidad Federal do Rio de Janeiro, Brasil	<a href="mailto:montenegro@if.ufrj.br">montenegro@if.ufrj.br</a>
36	Otranto	Sebastián	Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca	<a href="mailto:sotranto@gmail.com">sotranto@gmail.com</a>
37	Quinto	Michele	Instituto de Física Rosario (IFIR), (CONICET-UNR)	<a href="mailto:quinto@ifir-conicet.gov.ar">quinto@ifir-conicet.gov.ar</a>
38	Rivarola	Roberto	Instituto de Física Rosario (IFIR), (CONICET-UNR)	<a href="mailto:rivarola@ifir-conicet.gov.ar">rivarola@ifir-conicet.gov.ar</a>
39	Rodríguez	Vladimir	Dto. de Física, Facultad de Ciencias Exactas, UBA, Buenos Aires	<a href="mailto:vladimirrch@gmail.com">vladimirrch@gmail.com</a>
40	Serra	Pablo	FaMAF – Universidad Nacional de Córdoba e IFEG - CONICET	<a href="mailto:pablo.serra@unc.edu.ar">pablo.serra@unc.edu.ar</a>
41	Stolterfoht	Nico	Helmholtz-Zentrum Berlin, Germany	<a href="mailto:nico@stolterfoht.com">nico@stolterfoht.com</a>