

100^a Reunión Nacional
de la
Asociación Física Argentina

22 al 25 de septiembre de 2015
Villa de Merlo, San Luis, Argentina



Comisión Directiva de la Asociación Física Argentina

Presidente

Antonio J. Ramírez Pastor

Secretario

Fernando M. Bulnes

Tesorero

Raúl H. López

Vocales

<i>Filial</i>	<i>Titulares</i>	<i>Suplentes</i>
<i>Bariloche</i>	Sebastián Bustingorri	Fabiana Laguna
<i>Buenos Aires</i>	Pablo Balenzuela	Miguel Larrotonda
<i>Córdoba</i>	Gustavo Monti	Daniel Zaccari
<i>La Plata</i>	Tomás Grigera	Carlos Carlevaro
<i>San Luis</i>	Marcos Rizzotto	Fabrizio Sánchez
<i>Santa Fe</i>	Javier Schmidt	Oscar Zandrón
<i>Sur</i>	Patricia Benedetti	Hilda Larroldo
<i>Tucumán</i>	Erlinda Ortiz	Jorge Ferreyra

Revisores de Cuentas

Francisco Sánchez

Eitel Peltzer y Blancá

Comité Organizador Local

Rodolfo D. Porasso (*coordinador*)

Julio Sirur Flores	Silvana Spagnotto
Rolando Belardinelli	Valeria Cornette
Marcelo Pasinetti	Jesica Benito
Federico Romá	Mara Dávila
Marcos Rizzotto	Moira Dolz

Y un gran número de docentes y alumnos del Departamento de Física de la Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas y Naturales (UNSL).

Comité Científico

Marcelo Nazzarro (*coordinador*)

Adriana Serquis (por la filial Bariloche)	Gabriel Mindlin (por la filial Buenos Aires)
Sergio Dain (por la filial Córdoba)	Eitel Peltzer y Blancá (por la filial La Plata)
Daniel Linares (por la filial San Luis)	Evelina García (por la filial Santa Fe)
Daniel Vega (por la filial Sur, Bahía Blanca)	Mónica Tirado (por la filial Tucumán)

¹ Centro Atómico Bariloche - CONICET, Comisión Nacional de Energía Atómica

² Centro Atómico Bariloche - Comisión Nacional de Energía Atómica

³ Centro Atómico Constituyentes, Comisión Nacional de Energía Atómica

En haces moleculares supersónicos diluidos, los gases son sobreenfriados mediante expansión adiabática. En estas condiciones se evita la condensación pero, excepto a muy bajas densidades, se observa la formación de pequeños agregados (clústers). La clusterización cambia dramáticamente las variables de estado macroscópicas del gas: presión y temperatura, modificando fuertemente la dinámica del gas. Una descripción detallada de estos procesos de clusterización está basada en el conocimiento preciso de la estructura molecular, de las interacciones entre las moléculas y con el gas de dilución, y de la dinámica de colisión.

En este trabajo presentamos mediciones de espectros de absorción infrarroja de SF₆, obteniendo las frecuencias e intensidades de los modos vibracionales, junto con cálculos *ab-initio* utilizando la aproximación de Hartree-Fock (HF) más correlaciones a segundo orden de la teoría de perturbaciones de Møller-Plesset (MP2), de la estructura molecular y de las interacciones, tanto entre moléculas de SF₆, como de las moléculas con el gas de dilución (argón).

Los cálculos de estructura nos permiten obtener frecuencias de vibración de las moléculas, tanto de los modos fundamentales como de los armónicos superiores utilizando aproximaciones armónicas y anarmónicas de campo autoconsistente (VSCF - *Vibrational Self-Consistent Field*). Para la contribución anarmónica, se utilizó una superficie de energía potencial, calculada con HF+MP2 sobre una grilla multidimensional con más de 65000 nodos, para resolver el sistema de ecuaciones acopladas en los modos de vibración moleculares.

En el caso de formación de agregados, calculamos las energías de interacción como función de la posición y orientación, obteniendo las superficies de energía para la formación de dímeros y pequeños agregados mixtos. También investigamos el efecto de la formación de estos agregados en la frecuencia de vibración de las moléculas.

Finalmente, se investigó la dinámica de formación de dímeros. Para ello primero se ajustaron potenciales de interacción entre especies utilizando los resultados de los cálculos *ab-initio*. Se estudió luego con estos potenciales la dinámica de transferencia de energía entre partículas y entre los distintos modos de la molécula y del dímero.

317. Estudio de fases secundarias en aceros inoxidables austeníticos mediante EBSD

Fernandez Bordin S P¹, Ranalli J M², Galván V³, Castellano G³, Limandri S³

¹ Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UNCuyo

² Instituto Sabato - Comisión Nacional de Energía Atómica

³ Instituto de Física Enrique Gaviola (CONICET-UNC)

La técnica de EBSD (difracción de electrones retrodispersados) se basa en el análisis de los patrones de difracción (conocidos como patrones de Kikuchi) obtenidos mediante la irradiación de una muestra por un haz de electrones. Esta técnica, permite el estudio de estructuras cristalinas (tipos de bordes y orientación de granos, micro textura cristalográfica, etc) con resolución submicrométrica. Consecuentemente, se ha convertido en una técnica muy útil en ciencia de materiales e ingeniería. Aún continua en desarrollo y existe un gran debate en cuanto a la resolución espacial máxima alcanzable, debido a que los mecanismos físicos que dan lugar a los patrones no están completamente entendidos.

En este trabajo aplicamos la técnica de EBSD al estudio de las fases presentes en aceros inoxidables sometidos a diferentes tratamientos térmicos. Presentamos un estudio detallado de la resolución de esta técnica mediante simulaciones Monte Carlo, a fin de determinar el tamaño mínimo de las fases detectables. Las muestras estudiadas presentan una matriz de austenita (FCC) y cantidades pequeñas de ferrita (BCC). Además se observaron precipitados (carburos, sulfuros, silicatos, etc) y, en algunos casos, fases intermetálicas (como la fase sigma). Estos precipitados y fases secundarias son difíciles de ver por difracción de rayos X convencional y técnicas metalográficas dado a su baja proporción. El carácter frágil de muchas de estas fases reduce la conformabilidad del acero; es por eso que el estudio de la formación y posterior evolución de las fases principales y secundarias resulta de vital importancia para predecir el comportamiento del material.

318. Estudio de la estructura electrónica del Mn en diferentes entornos químicos mediante espectros de rayos X blandos de alta resolución

Sanchez E^{1 2 3}, Torres Deluigi M^{1 3}

¹ Departamento de Física, Facultad de Ciencias Físicas, Matemáticas y Naturales - Universidad Nacional de San Luis

² CONICET

³ Laboratorio De Microscopía Electrónica Y Microanálisis - Universidad Nacional de San Luis

Con el propósito de comprender estructura electrónica de los metales de transición en diferentes materiales es necesario obtener información sobre los estados de oxidación, el entorno químico, y la estructura local alrededor de los centros metálicos. La producción de rayos X por medio del impacto de electrones es una técnica adecuada para determinar los estados de oxidación, ya que explora los niveles 3d ocupados y los estados del spin de los metales de transición.

En este trabajo se estudian las líneas L de emisión de rayos-x del Mn en distintos compuestos. Las muestras fueron excitadas por medio de electrones, de baja energía (5 KeV), en un microscopio electrónico que tiene acoplado un espectrómetro dispersivo en longitudes de onda con el cual se obtuvieron los espectros de alta resolución experimentales analizados.

El beneficio de utilizar rayos X blandos (líneas L) para estudiar metales de transición 3d es la mayor vida media de la vacancia interna, comparada con el correspondiente a las líneas K de los rayos X duros. Esto provoca una disminución en el ancho natural de las líneas lo que se refleja experimentalmente en espectros de mayor resolución.

Los compuestos medidos de Mn fueron seleccionados de manera que tuvieran diferentes estados de oxidación y entornos químicos. Se observó que para los distintos compuestos las intensidades y las posiciones energéticas de las líneas L cambian. Sin embargo la mayor diferencia encontrada (entre los espectros de los compuestos de Mn analizados), no fueron cambios notables en la posición energética sino que, fueron los cambios en la probabilidad de transición $L\beta$ respecto a $L\alpha$, la cual que se aparta ligeramente en algunos compuestos de 1/2 que es el valor teórico predicho. Finalmente comparamos nuestros resultados experimentales con los obtenidos por otros autores utilizando distintas técnicas [1, 2].

Referencias

[1] M.V. Yablonskikh, Yu.M. Yarmoshenko, I.V. Solovyev, E.Z. Kurmaev, L.-C. Duda, T. Schmitt, M. Magnuson, J. Nordgren, A. Resonant $L_{\alpha,\beta}$ X-ray emission and $L_{3,2}$ X-ray absorption spectra of 3d metals in Co₂MnZ (Z = Al, Ga, Sn, Sb) Heusler alloys as an element-selective probe of spin character of valence band. *Moewes Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, 144?147 (2005) 765.

[2] J. Jin, G.S. Chang, W. Xu, Y.X. Zhou, D.W. Boukhalov, L.D. Finkelstein, E.Z. Kurmaev, X.Y. Zhang, A. Moewes, Electronic structure of Mn in (Zn, Mn)O probed by resonant X-ray emission spectroscopy. *Solid State Communications* 150 (2010) 1065.

319. Estudio de la estructura electrónica y espectros de XANES en NiO y MgO utilizando diferentes aproximaciones al potencial dentro del método de Ondas Planas Aumentadas (FP-LAPW)

Grad G¹, Bonzi E¹

¹ Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba

Se realizan cálculos ab initio con el método de ondas planas aumentadas (FP-LAPW) [1] comparando PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof), LDA+U y TB-mBJ (modified Becke-Johnson exchange potential). Este último es un potencial recientemente desarrollado para modelar el potencial de Coulomb creado por el hueco de correlación [2]. Estudio de estructura electrónica y espectros de XANES en NiO y MgO utilizando diferentes aproximaciones al potencial dentro del método de Ondas Planas Linealizadas Aumentadas (FP-LAPW). Se investiga el efecto del TB-mBJ en la estructura de bandas, densidad de estados y espectros de XANES de óxidos como NiO y MgO. Se aplica la técnica del "core hole" para comparar con los espectros experimentales y determinar en qué caso se obtiene los mejores resultados.

[1] P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Kvasnicka and J. Luitz, WIEN2k: An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, (Karlheinz Schwarz, Techn. Universität Wien, Austria), 2001. ISBN 3-9501031-1-2.

[2] F. Tran, P. Blaha, and K. Schwarz, *J. Phys.: Condens. Matter* 19, 196208 (2007).

[3] F. Tran and P. Blaha, *Phys. Rev. Lett.* 102, 226401 (2009).

[4] D. Koller, F. Tran and P. Blaha, *Phys. B* 85 (2012) 155109.

[5] W. Hetaba, P. Blaha, F. Tran and P. Schattschneider, *Phys. B* 85 (2012) 205108.

320. Estudio de la influencia del potencial inducido en la probabilidad de emisión electrónica por la doble incidencia de un pulso XUV y un pulso NIR

Rios Rubiano C A^{1 2}, Della Picca R^{1 2}, Silkin V M^{3 4 5}, Gravielle M S⁶

¹ Departamento de Interacción de Radiación con la Materia - Comisión Nacional de Energía Atómica

² CONICET

³ IKERBASQUE, Basque Foundation for Science, Bilbao, España

⁴ Depto. Física de Materiales (UPV/EHU), San Sebastián, España

⁵ Donostia International Physics Center

⁶ Instituto de Astronomía y Física del Espacio, CONICET-UBA

A partir de los avances tecnológicos en la generación de pulsos láser han surgido diversas propuestas para el estudio de la dinámica electrónica en la materia. Uno de estas nuevas herramientas es la denominada espectroscopia de los attosegundos (AS) [1], la cual consiste en la incidencia de dos pulso láser, uno en el extremo ultravioleta (XUV) y otro en el infra-rojo cercano (NIR), los cuales se caracterizan por tener duraciones del orden de los atto- y femto- segundos, respectivamente, y un retardo temporal τ entre sus máximos. En este trabajo se estudia la emisión electrónica desde una superficie Mg(0001) producida por pulsos láser ultracortos con el propósito de contribuir al entendimiento de recientes resultados de AS para esta superficie [2]. En particular, se investiga la influencia del potencial inducido, originado por la respuesta dinámica de los electrones de valencia al campo láser, sobre el espectro foto-electrónico, considerando diferentes valores de τ . Para describir el proceso proponemos una aproximación denominada Band-Structure Based Volkov (BSB-V) [3], la cual es desarrollada dentro del formalismo de onda distorsionada dependiente del tiempo e incluye una representación precisa del potencial