

## INFORME CIENTIFICO DE BECA

Legajo N°:

### **BECA DE**

Estudio

**PERIODO 2014**1. **APELLIDO:** Cravero**NOMBRES:** Fiorella*Dirección electrónica (donde desea recibir información):* fiorcravero7@gmail.com

**2. TEMA DE INVESTIGACIÓN** (Debe adjuntarse copia del plan de actividades presentado con la solicitud de Beca)

“Desarrollo de Nuevos Descriptores Moleculares para Polímeros de Alto Peso Molecular Aplicado a la Predicción de Propiedades Previo a la Síntesis de Nuevos Materiales”

A menudo debe hacerse una selección entre distintos materiales de modo de satisfacer requisitos de rendimiento y/o costo [1]. Al abordar un problema de diseño, el ingeniero pensará primero en las propiedades que desea para un material específico. Aunque el enfoque típico en el diseño de nuevos materiales ha sido empírico, actualmente se avanzó mucho en el conocimiento de las relaciones entre la estructura molecular de un material y sus propiedades, lo que conduce a la capacidad de predecir las propiedades del material, previo a su síntesis [2]. Estos avances condujeron a mejorar la capacidad de predecir las propiedades del material previo a su síntesis, que a su vez se traduce en enormes ahorros en tiempo y costo. Sin embargo, no es fácil conseguir estas predicciones ya que las variables que intervienen son muy complejas desde un punto de vista cuantitativo y cualitativo. De este modo, el diseño y la síntesis de nuevos materiales con propiedades específicas y novedosas han resultado en uno de los campos más dinámicos de la ciencia moderna [1].

En el mundo actual, los plásticos o polímeros están en todas partes y su uso se ha incrementado casi 20 veces en los últimos 30 años. Los polímeros han sido modificados con el fin de mejorar su utilidad y en consecuencia se han desarrollado polímeros sintéticos [3].

Estudiar la posibilidad de estimar o predecir las propiedades mecánicas de un "polímero virtual" (molécula de diseño) antes de la síntesis es nuestro objetivo. Este dominio ha sido poco investigado debido a su complejidad. Sin embargo, sería una herramienta muy útil para describir el perfil de aplicación del nuevo polímero, ahorrando así tiempo y dinero. Muchos investigadores han adoptado enfoques computacionales para predecir comportamientos de materiales [4]. En particular, la técnica de QSPR (Quantitative Structure- Property Relationship) relaciona parámetros específicos de la estructura de la molécula (descriptores moleculares) con la propiedad estudiada mediante el uso de un conjunto de datos de moléculas y valores de propiedad experimentales.

Esta técnica comenzó a ser utilizada para predecir propiedades de materiales en los años 80 [4]. Desde entonces, esta área de estudio ha sido muy compleja ya que no sólo depende de las propiedades intrínsecas, sino de la historia del material (método de síntesis, procesamiento, y preparación para los ensayos) y en especial el perfil mecánico ha sido muy poco explorado. Por lo tanto, es importante para el desarrollo de la técnica QSPR, generar descriptores que tengan en cuenta todos estos aspectos, es decir, las propiedades físico-

químicas del material y descriptores relacionados con la síntesis, procesamiento y la preparación de las muestras, de modo de obtener modelos más predictivos, útiles e interpretables [4]. Por otra parte, al abordar la problemática de los polímeros sintéticos, aparece la dificultad del diseño molecular ya que la representación de estructuras poliméricas no se puede definir claramente a diferencia de las moléculas pequeñas. Entre otros factores a considerar se encuentran: la estructura (por ejemplo, longitud de la cadena, tacticidad y segmentos de monómero) y los de la composición (contenido de monómeros, mezclas y aditivos) [5]. Por estas razones, también se convierte en un desafío generar un conjunto de datos asociados que sean confiables.

Nuestra hipótesis para el presente plan de trabajo, en el contexto de las investigaciones de nuestro grupo, es que la aplicabilidad de nuestros desarrollos en el marco de modelado QSPR para diseño de fármacos y los primeros aportes sobre polímeros puede trasladarse de manera efectiva al campo del diseño de materiales, siempre que las dificultades presentes en el cálculo de descriptores moleculares para materiales poliméricos puedan ser salvadas a través de técnicas de cómputo de descriptores especialmente orientadas a este tipo de macromoléculas. En tal sentido, creemos que la clave para lograr estos desafíos consiste en incorporar información relativa no sólo a la estructura de estas moléculas, sino también a su proceso de síntesis, historia térmica y la variabilidad de los pesos moleculares que presentan estos materiales, entre otros aspectos que definen su perfil de aplicación.

- [1]. Handbook of Materials Selection. Editor: Myer Kutz, first ed., John Wiley & Sons, New York, United States, 2002.
- [2]. D.W. Van Krevelen, Properties of Polymers, fourth ed., Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 2009.
- [3]. Polymer Blends Handbook, Editor: L.A. Utracki, first ed., Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands, 2002.
- [4]. T. Le, V. C. Epa, F. R. Burden, and D. A. Winkler. "Quantitative Structure-Property Relationship Modeling of Diverse Materials Properties". Chem. Rev. 112, (2012) 2889–2919.
- [5]. N. Adams and U. S. Schubert. "From Data to Knowledge: Chemical Data Management, Data Mining, and Modeling in Polymer Science". J. Comb. Chem. 6, (2004) 12-23.

A continuación se presenta el cronograma estipulado para estas investigaciones, como se había mencionado oportunamente, se enmarcan en el contexto de realización de una tesis doctoral (proyectada a 4 años), los directores propuestos prefirieron detallar un cronograma de 4 años aún sabiendo que la beca tiene duración de un año (renovable por un año más).

Plan de actividades:

Actividad 1: Revisión bibliográfica (1º y 2º trimestre)

Actividad 2: Realización de cursos de posgrado (1º, 2º, 3º, 4º, 5º, 6º, 7º, 8º, 9º y 10º trimestre)

Actividad 3: Estudio de principales algoritmos disponibles y sus implementaciones más difundidas (herramientas computacionales). (2º, 3º, 4º y 5º trimestre)

Actividad 4: Modelado de elongación a la rotura, introduciendo relaciones físico-químicas asociadas a ductilidad y resistencia, teniendo en cuenta la dispersión de pesos moleculares. (4º, 5º, 6º y 7º trimestre)

Actividad 5: Evaluación del desempeño de la nueva propuesta. Comparación con los modelos previos. Validación. (6º, 7º, 8º y 9º trimestre)

Actividad 6: Análisis de otros descriptores moleculares no considerados hasta el momento, en especial aquellos que consideran al material con su dispersión de peso molecular. Posible desarrollo de nuevos modelos en base a los mismos. (8º, 9º, 10º y 11º trimestre)

Actividad 7: Modelado de propiedades mecánicas no estudiadas hasta el momento (derivadas del ensayo de tensión y de impacto), ópticas y eléctricas de polímeros termoplásticos siguiendo la metodología propuesta en 3, 4 y 5. (10º, 11º, 12º y 13º trimestre)

Actividad 8: Validación de los modelos. (12º, 13º, 14º y 15º trimestre)

Actividad 9: Redacción de la tesis doctoral y defensa. (14º, 15º y 16º trimestre)

### 3. OTROS DATOS (Completar lo que corresponda)

**BECA DE ESTUDIO: 1º AÑO:** *Fecha de iniciación:* 01/04/2014

**2º AÑO:** *Fecha de iniciación:*

**BECA DE PERFECCIONAMIENTO: 1º AÑO:** *Fecha de iniciación:*

**2º AÑO:** *Fecha de iniciación:*

### 4. INSTITUCIÓN DONDE DESARROLLA LOS TRABAJOS

*Universidad y/o Centro:* Planta Piloto de Ingeniería Química (UNS-CONICET)

*Facultad:*

*Departamento:*

*Cátedra:*

*Otros:*

*Dirección: Calle:* Camino La Carrindanga N°: Km 7

*Localidad:* Bahía Blanca *CP:* 8000 *Tel:* 0291-4861700

### 5. DIRECTOR DE BECA

*Apellido y Nombres:* Díaz, Mónica Fátima

*Dirección electrónica:* monicafatimadiaz@gmail.com

### 6. EXPOSICIÓN SINTÉTICA DE LA LABOR DESARROLLADA EN EL PERIODO. (Debe exponerse la orientación impuesta a los trabajos, técnicas empleadas, métodos, etc., y dificultades encontradas en el desarrollo de los mismos, en el plano científico y material).

Durante el periodo de beca se realizaron las actividades propuestas en el plan de trabajo para el primer año según el cronograma propuesto, a saber:

Actividad 1: Revisión bibliográfica (y continua).

Actividad 2: Realización de cursos de posgrado (y continua).

Actividad 3: Estudio de principales algoritmos disponibles y sus implementaciones más difundidas (herramientas computacionales) (y continua).

Actividad 4: Modelado QSPR de elongación a la rotura, introduciendo relaciones físico-químicas asociadas a ductilidad y resistencia, teniendo en cuenta la dispersión de pesos moleculares (y continua).

Con respecto a la Actividad 1 y 3, se realizó una revisión detallada de bibliografía considerada de cabecera en el área [1-5], así como de trabajos previos en el grupo ya que se cuenta con experiencia en el desarrollo de herramientas predictivas QSPR

(Quantitative Structure-Property Relationships) como en la aplicación de las mismas en diferentes campos [6-12]. También se revisaron las contribuciones más recientes que fueron publicándose este último par de años.

En cuanto a la Actividad 2, como se detalla en el punto 10 de este formulario se realizaron, por el momento, 8 cursos de posgrado formativos para la disciplina. Producto del curso "Minería Web", se ha publicado el trabajo citado en el apartado 7.5.1.

En relación a la Actividad 3 y 4, se comenzó a aplicar la metodología QSPR a la predicción de propiedades mecánicas de polímeros sintéticos de alto peso molecular. La predicción de propiedades asociadas a entidades químicas mediante métodos informáticos corresponde a un área dentro de la química computacional o quimioinformática. Las herramientas con mayor desarrollo en la actualidad son los métodos de inteligencia computacional, que intentan descubrir las relaciones del modelo de predicción a partir de procesos de inferencia computacional aplicados sobre datos experimentales. La tarea de diseñar modelos QSPR enfrenta algunos desafíos intrínsecos como determinar el conjunto de descriptores moleculares óptimos a utilizar en el modelo. Este problema es complejo dado que el universo de posibles descriptores a usar en el modelado es muy amplio y generalmente se desconocen cuáles son los más relevantes para la propiedad en estudio. Otro de los problemas está relacionado con la representación computacional del polímero, debido al gran tamaño de los mismos. Para dar respuesta a estos problemas, como solución al primero se aplicó una herramienta desarrollada en nuestro grupo denominada DELPHOS [6] (método tradicional de selección de descriptores basado en Algoritmos Genéticos), siempre en combinación con el conocimiento del experto, con el objetivo de maximizar la interpretabilidad fisicoquímica del modelo y minimizar la cardinalidad, evitando así redundancia. El segundo problema fue abordado mediante la representación sintética de monómeros y trímeros de los polímeros presentes en las bases de datos. De manera integral, usando redes neuronales se lograron modelos confiables, interpretables y de baja cardinalidad que fueron publicados como se señaló en el apartado 7.5.3 y 7.5.4. A continuación de estos trabajos, se comenzó con la aplicación de técnicas de Analítica Visual, cuyos grafos interactivos facilitan la tarea de construcción y evaluación de los modelos QSPR. Como fruto de estos primeros pasos en la aplicación de estas técnicas se presentó un trabajo a congreso como consta en el punto 7.5.2.

- [1]. Handbook of Materials Selection. Editor: Myer Kutz, first ed., John Wiley & Sons, New York, United States, 2002.
- [2]. D.W. Van Krevelen, Properties of Polymers, fourth ed., Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 2009.
- [3]. Polymer Blends Handbook, Editor: L.A. Utracki, first ed., Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands, 2002.
- [4]. T. Le, V. C. Epa, F. R. Burden, and D. A. Winkler. "Quantitative Structure-Property Relationship Modeling of Diverse Materials Properties". Chem. Rev. 112, (2012) 2889–2919.
- [5]. N. Adams and U. S. Schubert. "From Data to Knowledge: Chemical Data Management, Data Mining, and Modeling in Polymer Science". J. Comb. Chem. 6, (2004) 12-23.
- [6]. A.J. Soto, R.J. Cecchini, G.E. Vazquez, I. Ponzoni. "Multi-Objective Feature Selection in QSAR/ QSPR using a Machine Learning Approach", QSAR & Combinatorial Science, Vol. 28, No. 11-12, (2009a) 1509-1523.
- [7]. A.J. Soto, I. Ponzoni, G.E. Vazquez. "Segregating Confident Predictions of Chemicals' Properties for Virtual Screening of Drugs", In: Omatu, Sigeru; Rocha, Miguel P.; Bravo, Jose; Fernández, Florentino; Corchado, Emilio; Bustillo, Andres; Corchado,

Juan M. (Eds.) Dist. Comp., Art. Int., Bioinformatics, Soft Comp.& Amb. Assisted Liv., IWANN 2009, Vol. 2, Salamanca, Spain, June 10-12. Lecture Notes in Computer Science, Vol. 5518, (2009b) 1005–1012

[8]. A.J. Soto, M. J. Martínez, R.L. Cecchini, G.E. Vazquez, I. Ponzoni. "DELPHOS: Computational Tool for Selection of Relevant Descriptors Subsets in ADMET Prediction", 1ra Reunión Internacional De Ciencias Farmacéuticas, Córdoba (Argentina), 24 y 25 de Junio, (2010).

[9]. A.J. Soto, G.E. Vazquez, M. Strickert, I. Ponzoni. "Target-driven subspace mapping methods and their applicability domain estimation", Molecular Informatics, Vol. 30, (2011) 779–789.

[10]. D. Palomba, M. J. Martínez, I. Ponzoni, M. F. Díaz, G. E. Vazquez, A. J. Soto. "QSPR Models for Predicting Log Pliver Values for Volatile Organic Compounds Combining Statistical Methods and Domain Knowledge". Molecules, 17 (12), (2012) 14937-14953.

[11]. D. Palomba, G.E. Vazquez, M.F. Díaz. "Novel descriptors from main and side chains of high-molecular-weight polymers applied to prediction of glass transition temperatures". Journal of Molecular Graphics and Modelling 38, (2012) 137–147.

[12]. D. Palomba, G. E. Vazquez, M. F. Díaz. "Prediction of Elongation at Break for Linear Polymers". Enviado a Journal of Computational Chemistry (Junio 2013).

## 7. TRABAJOS DE INVESTIGACIÓN REALIZADOS O PUBLICADOS EN EL PERIODO.

**7.1. PUBLICACIONES.** Debe hacerse referencia, exclusivamente a aquellas publicaciones en la cual se halla hecho explícita mención de su calidad de Becario de la CIC. (Ver instructivo para la publicación de trabajos, comunicaciones, tesis, etc.). Toda publicación donde no figure dicha aclaración no debe ser adjuntada. Indicar el nombre de los autores de cada trabajo, en el mismo orden que aparecen en la publicación, informe o memoria técnica, donde fue publicado, volumen, página y año si corresponde; asignándole a cada uno un número. En cada trabajo que el investigador presente -si lo considerase de importancia- agregará una nota justificando el mismo y su grado de participación.

**7.2. PUBLICACIONES EN PRENSA.** (Aceptados para su publicación. Acompañar copia de cada uno de los trabajos y comprobante de aceptación, indicando lugar a que ha sido remitido. Ver punto 7.1.)

**7.3. PUBLICACIONES ENVIADAS Y AUN NO ACEPTADAS PARA SU PUBLICACIÓN.** (Adjuntar copia de cada uno de los trabajos. Ver punto 7.1.)

**7.4. PUBLICACIONES TERMINADAS Y AUN NO ENVIADAS PARA SU PUBLICACIÓN.** (Adjuntar resúmenes de no más de 200 palabras)

**7.5. COMUNICACIONES.** (No consignar los trabajos anotados en los subtítulos anteriores)

1. "PaNText: A novel methodology to assemble Pathway Networks using Text Mining" (3 pag).

Julieta S. Dussaut, Fiorella Cravero, Ignacio Ponzoni, Ana G. Maguitman, Rocío L. Cecchini

Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional (5CAB2C)

Lugar: San Carlos de Bariloche; Fecha: 22 - 24 Septiembre, 2014.

2. "Interactive Visual Analysis Methodology for Improving Descriptor Selection in QSPR: First Steps" (3 pag).

María Jimena Martínez, Fiorella Cravero, Gustavo E. Vazquez, Mónica F. Díaz, Axel J. Soto, Ignacio Ponzoni

Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional (5CAB2C)

Lugar: San Carlos de Bariloche; Fecha: 22 - 24 Septiembre, 2014.

3. "Prediction of tensile modulus for linear polymers applied to new materials development" (5 pag).

Damián Palomba, Fiorella Cravero, Gustavo Esteban Vazquez, Mónica Fátima Díaz. Congreso Internacional de Metalurgia y Materiales Sam-Conamet/Iberomat/Materia 2014.

Lugar: Santa Fe, Argentina; Fecha: 21–24 Octubre, 2014.

4. "Prediction of tensile strength at break for linear polymers applied to new materials development" (5 pag).

Damián Palomba, Fiorella Cravero, Gustavo Esteban Vazquez, Mónica Fátima Díaz. Congreso Internacional de Metalurgia y Materiales Sam-Conamet/Iberomat/Materia 2014.

Lugar: Santa Fe, Argentina; Fecha: 21–24 Octubre, 2014.

## **7.6. TRABAJOS EN REALIZACIÓN.** (Indicar en forma breve el estado en que se encuentran)

## **8. OTROS TRABAJOS REALIZADOS.** (Publicaciones de divulgación, textos, etc.)

### **8.1. DOCENCIA**

### **8.2. DIVULGACIÓN**

### **8.3. OTROS**

## **9. ASISTENCIA A REUNIONES CIENTÍFICAS.** (Se indicará la denominación, lugar y fecha de realización y títulos de los trabajos o comunicaciones presentadas)

1. V Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional (5CAB2C)

Lugar: San Carlos de Bariloche; Fecha: 22 -24, Septiembre 2014;

a) "PaNTex: A novel methodology to assemble Pathway Networks using Text Mining"

Julieta S. Dussaut, Fiorella Cravero, Ignacio Ponzoni, Ana G. Maguitman, Rocío L. Cecchini

b) "Interactive Visual Analysis Methodology for Improving Descriptor Selection in QSPR: First Steps"

María Jimena Martínez, Fiorella Cravero, Gustavo E. Vazquez, Mónica F. Díaz, Axel J. Soto, Ignacio Ponzoni

2. Congreso Internacional de Metalurgia y Materiales. 14° Sam-Conamet. XIII Iberomat. XIII Simposio Materia.

Lugar: Santa Fe, Argentina; Fecha: 21–24 Octubre, 2014

a) "Prediction of tensile modulus for linear polymers applied to new materials development"  
Damián Palomba, Fiorella Cravero, Gustavo Esteban Vazquez, Mónica Fátima Díaz.

b) "Prediction of tensile strength at break for linear polymers applied to new materials development"

Damián Palomba, Fiorella Cravero, Gustavo Esteban Vazquez, Mónica Fátima Díaz.

**10. CURSOS DE PERFECCIONAMIENTO, VIAJES DE ESTUDIO, ETC.** (Señalar características del curso o motivo del viaje, duración, instituciones visitadas y si se realizó algún entrenamiento)

Se realizaron los siguientes cursos de posgrado:

Materia: Física Moderna. Departamento de Física – Universidad Nacional del Sur.

Profesores: Dr. Alfredo Juan, Dra. Carolina Pistonesi

Condición: Aprobada con Examen Final.

Tipo: Curso

Calidad: Posgrado

Materia: Metodología de la Investigación Científica. Departamento de Humanidades – Universidad Nacional del Sur.

Profesora: Mg. Fabiana Tolcachier

Condición: Aprobada con Examen Final.

Tipo: Curso

Calidad: Posgrado

Materia: Visual Text Analytics. Departamento de Computación – Universidad Nacional del Sur.

Profesores: Dr. Evangelos E. Milios (Dalhousie University) - Dr. Alex Soto (Dalhousie University)

Condición: Aprobada con Examen Final.

Tipo: Curso

Calidad: Posgrado

Materia: Análisis de Regresión. Departamento de Matemática – Universidad Nacional del Sur.

Profesora: Dra. Winzer Nelida

Condición: Aprobada con Examen Final.

Tipo: Curso

Calidad: Posgrado

Materia: Minería Web. Departamento de Computación – Universidad Nacional del Sur.

Profesora: Dra. Ana Maguitman.

Condición: En curso

Tipo: Curso

Calidad: Posgrado

Materia: Caracterización de Materiales. Departamento de Física, Departamento de Geología, Departamento de Ingeniería, Departamento de Ingeniería Química, Departamento de Química – Universidad Nacional del Sur.

Profesores: Dr. Marcelo Villar, Dra. Marta Dailoff, Dra. María Alejandra Miranda, Dra. M. Julia Yanez, Dra. Graciela Mas.

Condición: En curso

Tipo: Curso

Calidad: Posgrado

Materia: Química del Sólido. Departamento de Química – Universidad Nacional del Sur.

Profesores: Dra. María Rosa Prat, Dr. Rubén Montani.

Condición: En curso

Tipo: Curso

Calidad: Posgrado

Materia: Estructura y Propiedades Mecánicas de los Materiales. Departamento de Ingeniería – Universidad Nacional del Sur.

Profesores: Ing. L. Iurman, Ing. A. Lucaioli, Dr. M. Failla.

Condición: En curso  
Tipo: Curso  
Calidad: Posgrado

#### **11. DISTINCIONES O PREMIOS OBTENIDOS EN EL PERIODO**

#### **12. TAREAS DOCENTES DESARROLLADAS EN EL PERIODO**

#### **13. OTROS ELEMENTOS DE JUICIO NO CONTEMPLADOS EN LOS TÍTULOS ANTERIORES** (Bajo este punto se indicará todo lo que se considere de interés para la evaluación de la tarea cumplida en el período)

Además de lo mencionado en los puntos anteriores, durante el período de la beca se colaboró con el Comité Organizador del "V Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional" (5CAB2C), que tuvo lugar en Septiembre de 2014 en la ciudad de San Carlos de Bariloche.

También, en la organización del "1er Encuentro de Estudiantes de Bioinformática y Biología Computacional de Argentina" (1E2B2CA) como parte del Comité Organizador, en el marco de una de las actividades realizadas por el Grupo de Estudiantes de Bioinformática y Biología Computacional de Argentina (RSG-Argentina, miembro parte del Student Council (SC) perteneciente a la International Society for Computational Biology (ISCB)). Dicho evento se realizó en Noviembre de 2014 en la Ciudad Autónoma de Buenos Aires.

#### **14. TÍTULO DEL PLAN DE TRABAJO A REALIZAR EN EL PERIODO DE PRORROGA O DE CAMBIO DE CATEGORÍA** (Deberá indicarse claramente las acciones a desarrollar)

"Desarrollo de Nuevos Descriptores Moleculares para Polímeros de Alto Peso Molecular Aplicado a la Predicción de Propiedades Previo a la Síntesis de Nuevos Materiales"

En el ítem 2, fueron presentadas las actividades programadas para 4 años de trabajo. El primer año fue completado y para el segundo año (solicitado en la prórroga) se pretende continuar con las actividades 1 a 4 y agregar las actividades 5 y 6 (Tablas con cronograma completo en archivo adjunto).

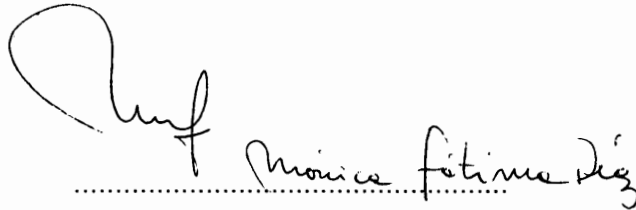
---

### **Condiciones de Presentación**

- A. El Informe Científico deberá presentarse dentro de una carpeta, con la documentación abrochada y en cuyo rótulo figure el Apellido y Nombre del Becario, la que deberá incluir:
- Una copia en papel A-4 (puntos 1 al 14).
  - Las copias de publicaciones y toda otra documentación respaldatoria, deben agregarse al término del desarrollo del informe
  - Informe del Director de tareas con la opinión del desarrollo del becario (en sobre cerrado).
-



**Nota:** El Becario que desee ser considerado a los fines de una prórroga, deberá solicitarlo en el formulario correspondiente, en los períodos que se establezcan en los cronogramas anuales.



.....

Firma del Director

Bolnis Blanca, 18/02/2015



.....

Firma del Becario

Fiorella Cravero

## ANEXO. TABLA DE ACTIVIDADES PLANIFICADAS PARA 4 AÑOS (2014-2017)

Tomada del formulario de pedido de beca be14.

### 6. CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES A DESARROLLAR EN EL PERÍODO DE LA BECA

Dado que estas investigaciones se enmarcan en el contexto de realización de una tesis doctoral, y teniendo presente que ya se encuentran planificadas las actividades para los tres primeros años de trabajo de la postulante, los directores propuestos prefieren detallar un cronograma trianual aun sabiendo que la beca tiene duración de un año (renovable por un año más). Esta decisión apunta a mostrar a los evaluadores la proyección futura de las investigaciones propuestas en este plan. La meta es completar los estudios de doctorado de la Lic. Cravero mediante dos becas de dos años (Estudio y Perfeccionamiento de la CIC).

Se propone el siguiente plan de actividades a fin de comenzar su tesis doctoral:

- Actividad 1: Revisión bibliográfica
- Actividad 2: Realización de cursos de posgrado
- Actividad 3: Estudio de principales algoritmos disponibles y sus implementaciones más difundidas (herramientas computacionales).
- Actividad 4: Modelado de elongación a la rotura, introduciendo relaciones físico-químicas asociadas a ductilidad y resistencia, teniendo en cuenta la dispersión de pesos moleculares.
- Actividad 5: Evaluación del desempeño de la nueva propuesta. Comparación con los modelos previos. Validación.
- Actividad 6: Análisis de otros descriptores moleculares no considerados hasta el momento, en especial aquellos que consideran al material con su dispersión de peso molecular. Posible desarrollo de nuevos modelos en base a los mismos.
- Actividad 7: Modelado de propiedades mecánicas no estudiadas hasta el momento (derivadas del ensayo de tensión y de impacto), ópticas y eléctricas de polímeros termoplásticos siguiendo la metodología propuesta en 3, 4 y 5.
- Actividad 8: Validación de los modelos.
- Actividad 9: Redacción de la tesis doctoral y defensa.

Estas actividades se realizarán según el siguiente cronograma organizado en trimestres:

Actividad	1er Año (2014)				2do Año (2015)				3er Año (2016)				4to Año (2017)			
	1°Tri.	2°Tri.	3°Tri.	4°Tri.	1°Tri.	2°Tri.	3°Tri.	4°Tri.	1°Tri.	2°Tri.	3°Tri.	4°Tri.	1°Tri.	2°Tri.	3°Tri.	4°Tri.
1																
2																
3																
4																
5																
6																
7																
8																
9																