



INFORME CIENTÍFICO-TECNOLÓGICO¹

PERIODO: 2013-2014

Legajo N°:

1. APELLIDO: **Pasquevich**.....
NOMBRES: **Alberto Felipe**.....

2. TEMA DE INVESTIGACION

Estudios de óxidos de interés tecnológico y de moléculas orgánicas.

3. DATOS RELATIVOS A INGRESO Y PROMOCIONES EN LA CARRERA

INGRESO: Categoría: **Asistente**Mes: **Noviembre** Año: **1980**

ACTUAL: Categoría: **Principal** desde el mes: **Julio** Año: **1999**

4. INSTITUCION DONDE DESARROLLA LA TAREA

Nombre: **Facultad. de Ciencias Exactas - Universidad Nacional de La Plata.**

Dependencia: **Departamento de Física.**

Dirección. Calle: **115 y 49 N° s/n.**

Ciudad: **La Plata** Pcia: **Buenos Aires**

Tel: **4246062/4247201**

Dirección electrónica: **pasquevi@fisica.unlp.edu.ar**

Cargo que ocupa: **Profesor adjunto ordinario dedicación exclusiva**

5. DIRECTOR DE TRABAJOS. (En el caso que corresponda) **No corresponde**

Apellido y Nombres:

Dirección. Calle

Ciudad: Pcia: Tel:

Dirección electrónica:

.....
Firma del Director (si corresponde)

.....
Firma del Investigador

Fecha **31/ 05/2015**

¹ Art. 11; Inc. "e"; Ley 9688 (Carrera del Investigador Científico y Tecnológico)

6. EXPOSICION SINTETICA DE LA LABOR DESARROLLADA EN EL PERIODO

El plan de trabajo desarrollado en el período fue, por una parte, una continuación del realizado en los últimos años, en relación con óxidos de interés tecnológico y por otra parte se inició una línea de investigación en el área de las aplicaciones biológicas. Se determinaron las interacciones hiperfinas de especiales impurezas en sólidos y en películas delgadas con la intención de relacionar estas interacciones con las propiedades del sistema impureza - matriz huésped. Las técnicas experimentales utilizadas fueron la de Correlaciones Angulares Perturbadas (PAC) y la Espectroscopía Mössbauer. Como técnicas complementarias para caracterizar las matrices huéspedes se utilizó la Difracción de Rayos X, la susceptibilidad magnética y el análisis termodiferencial. Como siempre el plan fue amplio para permitir sobrellevar dificultades que resultaran insalvables, como es la falla de equipos ó la falta de materiales para preparar muestras.

Un resultado muy importante del período informado fue la culminación del trabajo de tesis de la Bioq. Cecilia Y. Chain. La tesis fue desarrollada bajo mi dirección, con la codirección de la Dra. Margarita García de Bravo, en el tema “Métodos nucleares aplicados al estudio de materiales de interés biológico”. Se debe destacar que esto ocurrió en los primeros meses del período, En el contexto de este trabajo se realizó una investigación de los complejos KHfDTPA y KZrDTPA mediante la técnica PAC. Los resultados fueron publicados (7.1.1) al año siguiente. Se continuó con la investigación de los gradientes de campo eléctrico existentes en sitios de los átomos de Hf en los complejos en solución, ya que el estudio previo había sido llevado a cabo utilizando cristales de los complejos. Los nuevos resultados aun requieren discusión. Se continuará con ese estudio en el presente período.

También se amplió la investigación hacia otra técnica nuclear de uso en el Departamento de Física y escasa aplicación en biología: la Espectroscopía de Aniquilación de Positrones (PAS). Se determinaron cavidades en tejidos sanos y en tumores con el fin de establecer la reproducibilidad de los resultados y analizar el posible impacto de la aplicación de la técnica PAS a materiales de interés biológico. Se presentó el año pasado una comunicación en un congreso nacional (7.5.3).

Visto el limitado campo de aplicación biológica de las técnicas PAC y PAS, se decidió ampliar el plan de investigación incluyendo otra técnica hiperfina, más popular en los sistemas de interés, la Espectroscopía Mössbauer (EM). Esta técnica fue utilizada para determinar el estado de oxidación del Fe en clusters Fe-S y Fe-Se en moléculas orgánicas. Estas investigaciones se realizaron en colaboración con el grupo del Dr. J. Cowan de la Universidad de Ohio (EEUU). En la tesis de la Bioq. Chain se presentaron los resultados obtenidos con el primero de los sistemas mencionados, plasmados en una publicación en el período informado (7.1.2) La investigación de las moléculas con Se aún continúa y se ha terminado un manuscrito (7.4.1) que será enviado para su publicación en breve.

Se continuó con el estudio de las interacciones hiperfinas en circones de diferentes procedencias con el fin de aportar información sobre la capacidad de retención de los materiales radiactivos que los mismos contienen naturalmente (7.3.1) y se continuó con la caracterización nanoscópica de materiales utilizados en la industria cerámica (7.5.1 - 2)

Se continuó con la investigación de los efectos de ciclos de absorción – desorción de hidrógeno por láminas de paladio. Este estudio es parte del trabajo de tesis del Lic. Rubén Quille Ramos quien trabaja en el INTI y viene a La Plata una vez por semana para la discusión de los resultados de los experimentos.

7. TRABAJOS DE INVESTIGACION REALIZADOS O PUBLICADOS EN ESTE PERIODO.

7.1 PUBLICACIONES.

- 7.1.1 – “Thermal behaviour of hafnium diethylenetriaminepentaacetate studied using the Perturbed Angular Correlation Technique”.
Chain, C.Y, Rivas P., Pasquevich, A.F.
Radiochimica Acta. 102, 459 (2014)
- 7.1.2 – “Glutathione-Complexed Iron-Sulfur Clusters. Reaction Intermediates and Evidence for a Template Effect Promoting Assembly and Stability.”
Wenbin Qi, Jingwei Li, C. Y Chain, G.A. Pasquevich, A. F. Pasquevich, and J. A. Cowan.
Chem. Commun., 2013,**49**, 6313-6315

He participado en las siguientes etapas del desarrollo de estos trabajos: planificación del experimento, preparación y tratamiento de muestras, obtención y tratamiento de datos con las técnicas hiperfinas utilizadas en cada caso, discusión de resultados y elaboración del manuscrito.

7.2 TRABAJOS EN PRENSA Y/O ACEPTADOS PARA SU PUBLICACIÓN.

No registro

7.3 TRABAJOS ENVIADOS Y AUN NO ACEPTADOS PARA SU PUBLICACION. Incluir un resumen de no más de 200 palabras de cada trabajo, indicando el lugar al que han sido enviados. Adjuntar copia de los manuscritos.

- 7.3.1 “Structure Characterization of natural and processed zircons with X-rays and nuclear techniques”
L.C. Damonte , P.C.Rivas ,A. F. Pasquevich , F. Andreola F. Bondioli, A Ferrari,
L.Tositti, G. Cinelli-
European Journal of Mineralogy

7.4 TRABAJOS TERMINADOS Y AUN NO ENVIADOS PARA SU PUBLICACION. Incluir un resumen de no más de 200 palabras de cada trabajo.

- 7.4.1 “Synthesis, Characterization and Biological Chemistry of a Glutathione Complexed [2Fe-2Se] Cluster”
Jingwei Li, Stephen A. Pearson, C. Y Chain, G.A. Pasquevich, A. F. Pasquevich and J. A. Cowan,

7.5 COMUNICACIONES. Incluir únicamente un listado y acompañar copia en papel de cada una. (No consignar los trabajos anotados en los subtítulos anteriores).

PROCEEDINGS O TRABAJOS EXTENDIDOS.

7.5.1 - “Caracterización nanoscópica de materiales cerámicos mediante la detección de radiación gama”.

C. Y. Chain, L.C. Damonte, P.C. Rivas, N. Rendtorff, A.F. Pasquevich
Actas del “XI Congreso y Exposición Internacional de la Industria Cerámica, del Vidrio, Refractarios y Suministros” – Octubre 2013 , Olavarría, Argentina.

7.5.2 - “Caracterización de arenas de circón empleadas en la industria cerámica”

P.C. Rivas, A.F. Pasquevich, L.C. Damonte
Actas del “XI Congreso y Exposición Internacional de la Industria Cerámica, del Vidrio, Refractarios y Suministros” – Octubre 2013, Olavarría, Argentina

7.5.3 – “Aplicación de la espectroscopía de aniquilación de positrones en el modo de medición de vidas medias al estudio de volúmenes libres en tumores murinos”.

C. Y. Chain, L.C. Damonte, A.F. Pasquevich
XII Congreso Argentino de Física Médica, I Congreso de Física Médica de las Américas y I Congreso de Medicina Nuclear y Diagnóstico por Imágenes de la AATMN – Mayo 2014, Buenos Aires, Argentina.

7.6 INFORMES Y MEMORIAS TECNICAS. Incluir un listado y acompañar copia en papel de cada uno o referencia de la labor y del lugar de consulta cuando corresponda.

No registro.

7 TRABAJOS DE DESARROLLO DE TECNOLOGÍAS.

7.5 DESARROLLOS TECNOLÓGICOS.

No registro.

7.6 PATENTES O EQUIVALENTES.

No registro.

7.7 PROYECTOS POTENCIALMENTE TRANSFERIBLES; NO CONCLUIDOS Y QUE ESTAN EN DESARROLLO.

No registro.

8.4 OTRAS ACTIVIDADES TECNOLÓGICAS CUYOS RESULTADOS NO SEAN PUBLICABLES (desarrollo de equipamientos, montajes de laboratorios, etc.).

8.5 Sugiera nombres (e informe las direcciones) de las personas de la actividad privada y/o pública que conocen su trabajo y que pueden opinar sobre la relevancia y el impacto económico y/o social de la/s tecnología/s desarrollada/s.

Dra. M. C. Caracoche,
Dr. F. H. Sánchez.
Dr. D. Mendoza Zélis.

8 SERVICIOS TECNOLÓGICOS.

No registro

9 PUBLICACIONES Y DESARROLLOS EN DOCENCIA, DIVULGACIÓN, etc.

10 DIRECCION DE BECARIOS Y/O INVESTIGADORES. Indicar nombres de los dirigidos, Instituciones de dependencia, temas de investigación y períodos.

Durante el presente período he dirigido a los investigadores:

C. Y. Chaín , becaria del CONICET hasta el 31 de marzo de 2014.

11 DIRECCION DE TESIS. Indicar nombres de los dirigidos y temas desarrollados y aclarar si las tesis son de maestría o de doctorado y si están en ejecución o han sido defendidas; en este último caso citar fecha.

Dirigí dos tesistas, que realizan el doctorado en la Facultad de Ciencias Exactas de la UNLP.

C. Y. Chaín , becaria del CONICET (“Métodos nucleares aplicados al estudio de materiales de interés biológico”). Tesis presentada el 19 de Marzo de 2013.

R. A. Quille (“Daño por hidrógeno en motores de combustión interna”). Beca finalizada el 31-3-2012. El tesista continúa su trabajo, con una dedicación de cinco horas semanales. A partir de la finalización de la beca ingresó en el INTI como profesional contratado.

DIRECCIÓN DE INSTITUTOS - PROGRAMAS - LABORATORIOS – ETC

Director de la línea de investigación del Instituto de Física de La Plata:
Caracterización de materiales mediante las interacciones hiperfinas de impurezas en sólidos.

12 PARTICIPACION EN REUNIONES CIENTIFICAS. Indicar la denominación, lugar y fecha de realización, tipo de participación que le cupo, títulos de los trabajos o comunicaciones presentadas y autores de los mismos.

- 13 **CURSOS DE PERFECCIONAMIENTO, VIAJES DE ESTUDIO, ETC.** Señalar características del curso o motivo del viaje, período, instituciones visitadas, etc.
- 14 **SUBSIDIOS RECIBIDOS EN EL PERIODO.** Indicar institución otorgante, fines de los mismos y montos recibidos.

- Subsidio de la Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires.

Período 2013 .

Monto: 6.300 pesos.

Subsidio de la Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires.

Período 2014 .

Monto: 7000 pesos.

- Subsidio automático de la UNLP.

Período 2013.

Monto: 5000 pesos.

- Subsidio automático de la UNLP.

Período 2014.

Monto: 5000 pesos.

- 15 **OTRAS FUENTES DE FINANCIAMIENTO, DISTINCIONES O PREMIOS OBTENIDOS EN EL PERIODO.**

- 16 **ACTUACION EN ORGANISMOS DE PLANEAMIENTO, PROMOCION O EJECUCION CIENTIFICA Y TECNOLÓGICA.** Indicar las principales gestiones realizadas durante el período y porcentaje aproximado de su tiempo que ha utilizado.

Miembro de la Comisión Asesora en el área Física, Matemáticas y Astronomía de la CICPBA. (2000 - 2015)

Porcentaje de tiempo utilizado: 5 %

- 17 **TAREAS DOCENTES DESARROLLADAS EN EL PERIODO.** Indicar el porcentaje aproximado de su tiempo que le han demandado.

Profesor de la asignatura *Física Cuántica* de la Carrera Licenciatura en Física Médica de la Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad Nacional de La Plata. Primer semestre 2013 y primer semestre 2014.

Profesor de la asignatura *Física Experimental IV* de la Carrera Licenciatura en Física de la Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad Nacional de La Plata. Segundo semestre 2013 y segundo semestre 2014.

Porcentaje de tiempo utilizado: 20 %

- 18 **OTROS ELEMENTOS DE JUICIO NO CONTEMPLADOS EN LOS TITULOS ANTERIORES.** Bajo este punto se indicará todo lo que se considere de interés para la evaluación de la tarea cumplida en el período.
- 19 **TITULO Y PLAN DE TRABAJO A REALIZAR EN EL PROXIMO PERIODO.** Desarrollar en no más de 3 páginas. Si corresponde, explicita la importancia de sus trabajos con relación a los intereses de la Provincia

Estudios de óxidos de interés tecnológico y de moléculas orgánicas.

Director: Dr. Alberto Pasquevich.

Investigadores: Dra. Laura Damonte, Dra. Patricia Rivas, Dra. Cecilia Yamil Chain y Dr. Nicolas Rendtorff.

Se trata de investigar propiedades de materiales mediante el análisis de las radiaciones gama que siguen a procesos de desintegración nuclear de isótopos apropiados. En particular se determinarán las interacciones hiperfinas de isótopos especiales, constituyentes de los materiales de interés, o introducidos como impurezas y se relacionarán los valores obtenidos con la distribución de carga ó de momentos magnéticos en torno de dichos isótopos. De esta forma es posible caracterizar nanoscópicamente los materiales. Las técnicas hiperfinas a utilizar serán esencialmente las Correlaciones Angulares Perturbadas y la Espectroscopía Mössbauer. La técnica de Aniquilación de Positrones, en la modalidad de determinación de vidas medias, se utilizará para caracterizar los defectos existentes en los materiales masivos.

Los materiales a estudiar serán, esencialmente, los siguientes:

- 1) Óxidos de interés tecnológico, en forma masiva o en forma de películas delgadas.
- 2) Moléculas orgánicas, cristalizadas o en solución.

La importancia del proyecto a nivel local, general y para la especialidad, radica en la utilización de facilidades experimentales y conocimiento que se viene gestando en la Facultad de Ciencias Exactas desde hace más de 40 años en la aplicación de la Espectroscopia Nuclear y las Interacciones Hiperfinas en la investigación de propiedades de materiales.

Óxidos de interés tecnológico

Los sistemas motivo de estudio de este Proyecto son, por un lado, polvos, películas y compactos de materiales cerámicos que incluyen a los elementos circonio o hafnio en su composición. Por otra parte el proyecto incluye la investigación de óxidos semiconductores y óxidos conductores transparentes.

Los mecanismos para estabilizar a temperatura ambiente las fases tetragonal y cúbica de alta temperatura de la zircona y de la hafnia (ZrO_2 y HfO_2) son objeto de gran interés tecnológico ya que los sistemas estabilizados presentan destacadas propiedades mecánicas, térmicas y eléctricas. Así, una de las metas en la presente investigación es establecer procedimientos y requisitos de diseño que permitan obtener circonas y hafnias metaestables de alta calidad, con excelentes propiedades, y que resistan variados y rigurosos tratamientos sin deterioro de las mismas. Es conocido que el agregado de ciertos óxidos (de Y, de Ca, de Mg, de Al, de Fe, de Sc, de tierras raras) bajo condiciones de preparación particulares estabiliza las fases metaestables mencionadas. La introducción de tales óxidos aliovalentes genera defectos estructurales que favorecen los fenómenos de transporte y cuya caracterización es de relevante importancia para sus aplicaciones. En este sentido las técnicas PAC y PAS se complementan adecuadamente para la descripción de los materiales investigados.

Se continuará el estudio de las interacciones hiperfinas en circones de diferentes procedencias con el fin de aportar información sobre la capacidad de retención de los materiales radiactivos que los mismos contienen naturalmente. Es bien conocido que los refractarios de mulita son importantes para el desarrollo de cerámicos tradicionales y avanzados. Sin embargo, su baja resistencia mecánica a temperatura ambiente ha motivado la inclusión de una segunda fase que mejore tal propiedad. Al respecto, la zircona ha resultado útil y hoy en día se dispone comercialmente de refractarios de mulita-zircona. Por otra parte y debido a la alta energía de activación para la difusión de iones, el proceso de sinterizado requiere del agregado de un aditivo de sinterización como la alúmina o el circonio y ha sido probado que el segundo es el que más contribuye al mejor desempeño del composito. La técnica PAC será usada en este caso para investigar el contenido de nanoconfiguraciones formadas durante la síntesis del composito mulita-zircona-circonio para diferentes relaciones de concentración mulita-zircona/circonio, contrastando los resultados con los obtenidos por análisis Rietveld. Los estudios preliminares muestran importantes discrepancias entre los resultados de ambas técnicas, que habrá que dilucidar. Esta temática surgió como una necesidad de un grupo de investigadores del CETMIC, que trabajan en estrecha cooperación con el grupo.

Respecto de los óxidos semiconductores y los óxidos conductores transparentes, estos vienen siendo estudiados en su forma masiva por el director y algunos de los miembros del grupo desde hace años. Estamos llevando a cabo una muy interesante investigación sobre propiedades de películas delgadas de $Ga_2O_3:^{111}In$ obtenidas por oxidación de películas comerciales de GaN previamente dopadas con ^{111}In por implantación iónica. Se espera culminar con estas investigaciones durante este período.

Moléculas orgánicas, cristalizadas o en solución congelada.

Esta línea de investigación, incluida en el proyecto, apunta a la aplicación de las técnicas PAC y EM, a la caracterización hiperfina de sitios metálicos en moléculas orgánicas. Esta línea se inició en el proyecto previo y comenzó a dar frutos recientemente. Hubo que realizar varios intentos para lograr el dopaje de moléculas orgánicas con los átomos radiactivos que la técnica PAC requiere, o con los isótopos ^{57}Fe adecuados para la espectroscopía Mössbauer.

Además, la cooperación con el grupo del Dr. J. Cowan de la Universidad de Ohio, que está interesado en los resultados que podemos aportar concernientes a estados de carga de clusters Fe-S y Fe-Se en proteínas, ha resultado un estímulo muy importante para continuar con estas investigaciones.

En este período se iniciará un trabajo en colaboración con científicos del Instituto Balseiro en relación con algas (*Chlamydomonas reinhardtii*) que pueden foto producir H₂ molecular via ferredoxina y la enzima reversible [Fe] hidrogenasa bajo condiciones anaeróbicas. Los clusters FeS son constituyentes de la ferredoxina y de la hidrogenasa y juegan un rol en el proceso de producción del H₂.