

101^a Reunión de la
Asociación Física Argentina

4 al 7 de octubre de 2016
San Miguel de Tucumán, Tucumán, Argentina



126. Efectos de orientación cristalográfica en la probabilidad de emisión de electrónica producidos por la incidencia rasante de pulsos láser ultracortos sobre superficie de aluminio

Rios Rubiano C A¹, Della Picca R¹, Mitnik D², Silkin V^{3 4 5}, Gravielle M S²

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

² Instituto de Astronomía y Física del Espacio, CONICET-UBA

³ Donostia International Physics Center

⁴ Universidad del País Vasco, San Sebastián España

⁵ IKERBASQUE, Basque Foundation for Science, Bilbao, España

Se investiga la influencia de la orientación cristalográfica de una superficie de un metal típico, como lo es aluminio, se calculan los espectros de emisión de electrones producidos por la incidencia rasante de pulsos láser ultracortos, utilizando la aproximación denominada band-structure-based-Volkov (BSB-V). Esta nueva versión del modelo BSB-V no sólo incluye una descripción realista de la interacción con la superficie, que incluye efectos de la estructura de bandas, sino que también incluye efectos debido al potencial inducido que se origina a partir de la respuesta dinámica de los electrones de la banda de valencia como respuesta al campo electromagnético incidente. Se aplica el modelo para evaluar las probabilidades diferenciales de emisión electrónica de la banda de valencia del Al(100) y Al(111). Se analizan por separado, y para ambas orientaciones cristalográficas, la contribución de los estados electrónicos parcialmente ocupados de la superficie y la influencia del potencial inducido tomando como parámetro la frecuencia portadora del láser. Además, con el fin de probar el rendimiento del método propuesto, los resultados se comparan con cálculos *ab initio* que se obtienen a partir de la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo.

127. Estadística fraccionaria aplicada al estudio de la adsorción de proteínas en multicapas

Takara A¹, Quiroga E¹, Matoz-Fernandez D A¹, Ochoa N A¹, Ramirez-Pastor A J¹

¹ INFAP-Universidad Nacional de San Luis

La adsorción de proteínas sobre superficies sólidas ha sido ampliamente estudiada debido al rol que este fenómeno juega en numerosas aplicaciones industriales y biotecnológicas. En este marco, es fundamental el entendimiento de las interacciones involucradas en dicho proceso. Varias teorías han sido propuestas para modelar datos experimentales de sistemas que involucran la adsorción de proteínas. Entre las más comúnmente conocidas podemos citar la ecuación de Langmuir, desarrollada para la adsorción en monocapa, y la teoría de Brunauer-Emmett-Teller (BET), para la adsorción en multicapas infinitas. Como consecuencia de las limitaciones que cada una de esas teorías posee, resulta dificultoso dilucidar con claridad el mecanismo de adsorción y la configuración de la proteína en el estado adsorbido. En este contexto, el objetivo principal del presente estudio fue aplicar un nuevo modelo teórico [Fractional Statistical Theory of Adsorption (FSTA)] [1], originalmente aplicado al estudio de adsorción de gases poliatómicos sobre superficies sólidas, para describir el proceso de adsorción de proteínas en solución. FSTA permite describir la adsorción en multicapa finita como un problema de estadística fraccionaria, basada en la teoría de Haldane [2]. En este esquema, la energía libre de Helmholtz y sus derivadas son expresadas en términos de un simple parámetro de exclusión estadística (g), directamente relacionado con la configuración espacial de las moléculas en el estado adsorbido. La FSTA aquí presentada incluye la teoría de Langmuir como un caso particular ($g = 1$), reproduce la ecuación de BET para $g = 0$ y