

ANALES

ISSN 2451-8182



TOMO 65
BUENOS AIRES
2013

ANALES
DE LA
ACADEMIA NACIONAL DE CIENCIAS
EXACTAS, FISICAS Y NATURALES
BUENOS AIRES

TOMO 65

BUENOS AIRES
2013

Esta publicación es propiedad de la
Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales

Director
Comisión de Publicaciones de la
Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales:
Dr. Enrique J. Baran, Ing. Horacio G. Reggini, Dr. Víctor J. Yohai

Lugar y fecha de edición
Buenos Aires, República Argentina, agosto de 2015

Toda la correspondencia referente a estos “Anales” debe dirigirse a:
All enquires regarding this publication should be addressed to:

Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales
Avda. Alvear 1711, 4° piso
1014 Buenos Aires
República Argentina

Tel.: (54-11) 4811-2998/(54-1) 4815-9451
Fax: (54-1) 4811-6951
E-mail Secretaría: acad@ancefn.org.ar
E-mail Biblioteca: biblio@ancefn.org.ar
Sitio web: www.ancefn.org.ar

SUMARIO

I. HOMENAJES

- Inicio de la Química de Coordinación: Homenaje a Alfred Werner en el centenario de su Premio Nobel de Química, por *E.J. Baran*..... 5

II. INCORPORACIONES DE ACADÉMICOS

- Presentación del Dr. Carlos Balseiro como Académico Correspondiente en S.C. de Bariloche, por *F. de la Cruz*..... 10
- Presentación del Dr. Rubén Zamar como Académico Correspondiente en Vancouver, Canadá, por *V.J. Yohai*..... 12
- Presentación del Dr. Alejandro Fainstein como Académico Correspondiente en S.C. de Bariloche, por *F. de la Cruz*..... 14
- Presentación del Dr. Mario Bunge como Académico Honorario en Montreal, Canadá, por *H.C. Reggini*..... 17
- Presentación de la Dra. Catherine Cesarsky como Académica Correspondiente en Paris, Francia, por *H. Vucetich*..... 19
- Presentación de la Dra. Sandra M. Diaz, como Académica Correspondiente en Córdoba, por *E.J. Baran*..... 20

III. ENTREGA DE LOS PREMIOS “ACADEMIA NACIONAL DE CIENCIAS EXACTAS, FÍSICAS Y NATURALES” - AÑO 2013

- Apertura del acto de entrega de premios, por *R.L.O. Cignoli*..... 23
- Premios ANCFN-2013..... 26
- Influencia del arco magmático protoandino en la acomodación sedimentaria, la fisiografía y las características de los depósitos del Jurásico Superior y Cretácico Inferior en la cuenca neuquina. Trabajo presentado por L.A. Spalletti al recibir el Premio Consagración de la ANCFN-2013 por la Sección de Ciencias Químicas, de la Tierra y Biológicas 28
- Simulación computacional de biomoléculas, un punto de encuentro entre la Físico-Química y la Biología Computacional. Trabajo presentado por M.A. Martí con motivo de recibir el premio *Pedro J. Aymonino* en Química..... 43
- Cerámicos piezoeléctricos libres de plomo en los sistemas $\text{Bi}_0.5(\text{Na}_{0.8}\text{K}_{0.2})0.5\text{TiO}_3$ y $\text{K}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{NbO}_3$. Trabajo presentado por *L.A. Ramajo* con motivo de recibir el premio Félix J. Lilli en Innovación Tecnológica.....,..... 50
- An innovative discrete event simulation tool to improve the efficiency of a complex beer packaging line. Trabajo presentado por *C. Méndez* con motivo de recibir el premio *Alberto S.C. Fava* en Ciencias de la Ingeniería..... 59
- Visualización molecular de procesos celulares. Trabajo presentado por H.E. Grecco con motivo de recibir el premio *Andrés Kálnay* en Física..... 80

IV. COMUNICACIONES DE ACADÉMICOS

- Halcones en el tenis y en el fútbol por *H.C. Reggini*..... 91

V. ENSAYOS DE BECARIOS

- Becarios “*In Libris Carpe Rosam*” (2011-2013)..... 98
- Becarios “*Eduardo G. Gros*” (2011-cont)..... 100

I

HOMENAJES

INICIO DE LA QUÍMICA DE COORDINACIÓN: HOMENAJE A ALFRED WERNER EN EL CENTENARIO DE SU PREMIO NOBEL DE QUÍMICA

Enrique J. Baran

Académico Titular de la Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales

Este año se cumple el primer centenario de la fecha en que Alfred Werner recibiera el Premio Nobel de Química, “for his work on the linkage of atoms in molecules, by which he has thrown fresh light on old problems and opened new fields of research, particularly in inorganic chemistry”, constituyéndose de esta manera en uno de los primeros químicos inorgánicos en obtener esta distinción y que significó, además, el inicio de la Química de Coordinación, una de las ramas de la Química que con el correr de los tiempos se ha transformado en una de las que más fuertes y continuados desarrollos han alcanzado, teniendo además un notable impacto en muchas actividades humanas.

Y en este contexto, lo primero que deberíamos remarcar es que en diversos artículos de difusión y aún en textos de Química Inorgánica (ver p. ejemplo [1]) se ha dicho que el Premio Nobel de Werner fue el primero otorgado en el campo de la Química Inorgánica, afirmación que no es correcta ya que anteriormente hubo otros dos Premios otorgados por investigaciones en esa misma área. Ellos son el Premio del año 1904, otorgado al británico William Ramsay (1852-1916), por su descubrimiento de la presencia de los gases nobles en el aire y la determinación de su ubicación en el Sistema Periódico de los Elementos, y el del año 1906 concedido al francés Henri Moissan (1852-1907), por la obtención del flúor elemental y el desarrollo del horno de arco eléctrico que le permitió alcanzar las altas temperaturas necesarias para la síntesis de numerosos nuevos compuestos inorgánicos (p-ej. boruros y carburos). Adicionalmente, podríamos incluir el otorgado en 1911 a Marie Curie (1867-1934) por el descubrimiento de dos nuevos elementos (radio y polonio) y el estudio de sus propiedades.

1. Breve bosquejo biográfico [2,3]

Alfred Werner había nacido el 12 de diciembre de 1866 en Mülhausen, Alsacia, (ciudad que en ese momento era parte de Francia y que en 1871, luego de la guerra franco-prusiana fue anexada transitoriamente a Alemania), donde realizó sus estudios escolares, mostrando ya de muy joven un fuerte interés por la Química.

Entre 1885 y 1886 hizo su servicio militar en Karlsruhe, periodo durante el cual asistió también al curso de Química Orgánica de Karl O.V. Engler en la Escuela Superior Técnica de esa ciudad. Al finalizar el servicio se trasladó a Zürich, cursando estudios en la Escuela Superior Técnica Federal (que luego se transformaría en la bien conocida ETH) donde en 1889 obtuvo su Diploma en Tecnología Química.



Inmediatamente se abocó a sus estudios doctorales, en el campo de la Química Orgánica, bajo la supervisión del Profesor Arthur Hantzsch, presentando al año siguiente su Tesis Doctoral a la Universidad de Zurich. La misma versaba sobre el ordenamiento espacial de átomos en moléculas conteniendo nitrógeno.

Entre 1890 y 1891 continuó realizando estudios sobre el mismo tema y también viajó a Paris, trabajando brevemente con Marcellin Berthelot en el Collège de France. En 1892 retornó a Suiza y al año siguiente fue nombrado Profesor Asociado en la Universidad de Zürich, encargándose del dictado de los cursos de Química Orgánica. Y en 1895, cuando contaba solo 29 años de edad, fue nombrado Profesor de Química de la misma Universidad, continuando con el dictado de Química Orgánica, hasta 1902, año en que también comenzó a dictar clases de Química Inorgánica, disciplina que siempre lo había atraído más fuertemente.

También durante 1895 adquirió la ciudadanía suiza y si bien en años subsiguientes fue convocado para incorporarse a las Universidades de Viena, Basilea y Würzburg, no aceptó esas invitaciones, prefiriendo continuar sus labores en Zürich. Por otra parte, en 1894 se casó con Emma Giesker, hija de una familia alemana radicada en la misma ciudad, con la que tuvo dos hijos, Alfred y Charlotte.

El nombre de Werner ha quedado siempre firmemente asociado a la teoría de la coordinación, cuyos fundamentos ya bosquejó a los 24 años de edad, en su trabajo de Tesis Doctoral. En este trabajo formuló la idea de que en numerosos compuestos de nitrógeno, los tres enlaces de valencia de ese átomo están dirigidos hacia los tres vértices de un tetraedro, mientras que el cuarto vértice está ocupado por el átomo de nitrógeno. Asimismo, desarrolló la idea de que la afinidad es una fuerza atractiva ejercida desde el centro de un átomo, actuando uniformemente en toda la superficie del mismo. Y, extendiendo este concepto, ya en un trabajo publicado en 1893 planteó la idea de “valencia secundaria” (ver Sec. 2) en la descripción de algunos compuestos inorgánicos.

Durante los siguientes 20 años, Werner y sus colaboradores publicaron una innumerable cantidad de trabajos en los que describieron la síntesis, caracterización y propiedades estructurales de una enorme cantidad de nuevos compuestos de coordinación, trabajos que culminaron con la determinación de actividad óptica en algunos de esos complejos (ver Secc. 3). Estas tareas se vieron reflejadas en más de 200 publicaciones científicas originales, así como en la culminación de un número similar de trabajos de Tesis Doctoral [3,4]. El grupo de colaboradores de Werner en Zúrich fue siempre muy grande e internacional, ya que recibió doctorandos de muchas partes del mundo e, incluso, tuvo siempre un núcleo muy importante de investigadoras mujeres, una situación muy poco frecuente en los albores del siglo XX [3]. Entre sus discípulos más conocidos se destacan los nombres de Paul Karrer y Paul Pfeiffer. El primero, fue su sucesor en el Instituto de Química de Zúrich y se transformó en un importante químico orgánico que también fue galardonado con el Premio Nobel de Química (1937). Por su parte Pfeiffer es considerado habitualmente como uno de los padres de la Química Supramolecular [3].

Las actividades y trabajos de Werner también dieron origen a dos libros muy importantes y valiosos: “*Anschauungen auf dem Gebiete der Anorganischen Chemie*” (“Perspectivas en el Campo de la Química Inorgánica”) [5] y “*Lehrbuch der Stereochemie*” (“Manual de Estereoquímica”) [6], considerados como dos obras fundamentales en el inicio de la moderna Química Inorgánica.

Finalmente, en 1913 fue galardonado con el Premio Nobel de Química. En la conferencia que dictó en esa oportunidad (11 de diciembre de 2013) con el título “On the constitution and configuration of higher-order compounds”, presentó un breve desarrollo histórico de la química de los compuestos de coordinación explicando luego, en forma muy clara y precisa, sus contribuciones a la clarificación definitiva de la estructura de esos complejos. Asimismo, presentó ejemplos detallados de la isomería de coordinación, isomería geométrica e isomería óptica de los mismos, basados en los resultados de sus propias investigaciones y estudios. Por lo tanto, esta conferencia constituye un excelente y pormenorizado resumen de los inicios de la Química de Coordinación y de sus aspectos y derivaciones más importantes.

Werner fue también miembro correspondiente de la Academia de Ciencias de Göttingen y de la Sociedad Físico-Médica de Erlangen, recibió el Doctorado Honorario de la Universidad de Ginebra, fue miembro honorario de la Sociedad Física de Frankfurt/Main, de la Bunsen-Gesellschaft de Alemania, de la Asociación de Ciencias Naturales de Lausana y de la Chemical Society de Londres. Asimismo, fue miembro permanente de la Sociedad Imperial de Amigos de la Historia Natural, Antropología y Etnografía de Moscú y el gobierno francés lo condecoró con la Medalla Leblanc de la Sociedad Química y lo distinguió como Oficial de Instrucción Pública. Asimismo, jugó un papel importante en la creación de la Sociedad Química de Suiza, de la que fue primer Presidente en 1901.

Ya en el momento de la recepción de su Premio Nobel, Werner estaba afectado de arterosclerosis, lo que en 1915 lo obligó a resignar parte de su actividad docente, alejándose definitivamente de ella en 1919. Finalmente, falleció el 15 de noviembre de ese año, a la temprana edad de 53 años.

2. La Teoría de Coordinación

Hacia fines del siglo XIX había llegado a tenerse una idea bastante clara acerca de las características de los enlaces químicos presentes en los compuestos orgánicos, que podían predecirse en base a algunas ideas y reglas muy simples relacionadas a la valencia del átomo de carbono. Sin embargo, los enlaces en los así llamados “compuestos moleculares”, incluyendo especies derivadas de los metales de transición, seguían siendo relativamente incomprensibles.

El aspecto más enigmático en torno a los compuestos derivados de metales de transición era que ellos aparecían poseyendo valencias más elevadas que las reconocidas. Así, mientras el principio de electroneutralidad se satisfacía con los iones negativos presentes, muchas veces aparecían otras especies asociadas al metal, generando estequiometrías más complejas tales como $\text{CoCl}_3 \cdot 6\text{NH}_3$, esto es “sales dobles”, como se las llamaba por entonces. Y, precisamente fue Werner quien presentó la solución a este conflictivo problema, a través de la arriba mencionada Teoría de la Coordinación.

Los tres postulados esenciales de esta Teoría son los siguientes [7,8]:

1. La mayor parte de los elementos posee dos tipos de valencia: a) valencia primaria (*Hauptvalenz*, en los términos de Werner) y b) valencia secundaria (*Nebenvaleanz*).
2. Todo elemento tiende a satisfacer tanto sus valencias primarias como secundarias.
3. Las valencias secundarias están dirigidas hacia posiciones fijas del espacio.

En términos modernos, las “sales dobles” se han transformado en lo que ahora denominamos compuestos o complejos de coordinación y en ellos la valencia primaria corresponde al estado de oxidación del metal y la secundaria a su índice o número de coordinación. En los propios términos de Werner “Aunque estén saturados en el sentido de la vieja teoría de valencia, los átomos elementales aún poseen suficiente afinidad química como para ligar a otros átomos aparentemente saturados o grupos de átomos, generando enlaces atómicos claramente definidos” [9]. Por otra parte, el tercer postulado encierra la base de la estereoquímica de los compuestos de coordinación.

En el ejemplo arriba mencionado, $\text{CoCl}_3 \cdot 6\text{NH}_3$, cloruro de hexammincobalto(III) según las actuales reglas de nomenclatura y formulable como $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_3$, la estructura del complejo es la mostrada en la Fig. 1. Como puede verse, el átomo de cobalto, en estado de oxidación +3, está ubicado en el centro de un octaedro cuyos vértices están ocupados por las seis moléculas de amoníaco (por lo tanto, el índice de coordinación del Co(III) es 6); los tres aniones cloruro neutralizan la carga eléctrica del complejo $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$, estando ubicados fuera de la esfera de coordinación del centro metálico.

3. Obra científica

La caracterización de amino complejos e hidratos de los metales de transición constituía, a fines del siglo XIX, uno de los problemas no resueltos de la en general considerada poco interesante Química Inorgánica [4]. Después de la síntesis de los primeros complejos de cobalto por parte de Leopold Gmelin (1788-1853), el estudio de compuestos de ese metal así como del platino, constituyeron el centro de las investigaciones de muchos químicos famosos de ese tiempo, siendo el más importante de los mismos el danés Sophus Mads Jørgensen (1837-1914), cuyos trabajos tuvieron además una estrecha relación y un directo impacto sobre los de Werner [10].

Los primeros investigadores que se dedicaron al estudio de este tipo de compuestos quedaron, ante todo, fascinados por la belleza y variedad de colores de los mismos, fascinación que incluso tuvo su correlato en la nomenclatura inicialmente utilizada para caracterizarlos y que se utilizó continuamente hasta fines de ese siglo. Ejemplos de la misma se presentan en la Tabla I, es decir se los denominaba complejo-lúteo, complejo-praseo, etc.

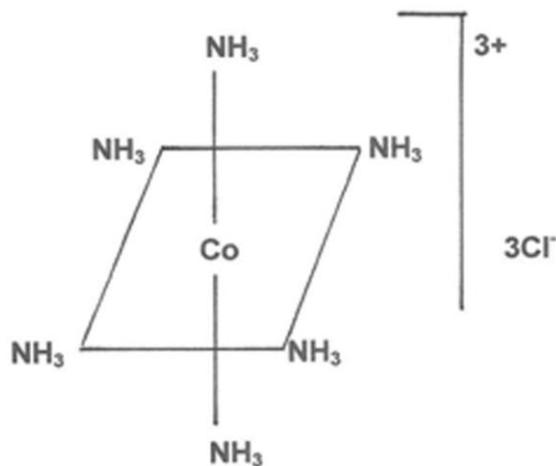


Fig. 1. Estructura del cloruro de hexamincobalto (III), $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_3$.

II

INCORPORACIONES DE ACADÉMICOS

PRESENTACIÓN DEL DR. CARLOS BALSEIRO COMO ACADÉMICO CORRESPONDIENTE EN SAN CARLOS DE BARILOCHE

Francisco de la Cruz

Académico Titular de la Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales

Antes de hablar de Carlos Balseiro me parece necesario describir el ambiente donde transcurrió su niñez y principio de juventud.

Hijo de José Antonio Balseiro, el constructor del Centro Atómico Bariloche e Instituto de Física (1955). Obra imposible de imaginar para la época. Solamente las firmes convicciones de José Antonio Balseiro, compartidas por unos pocos, muy pocos, podían transmitir confianza hacia un futuro.

Ingresé al Instituto en 1958. No se respiraba estabilidad institucional pero había convicción. Balseiro solía decir si pasa...cerramos las persianas y nos vamos. Ese sentimiento de “propiedad” ponía de manifiesto su visión y misión.

Balseiro, aunque preocupado y ocupado por la administración del Centro, consideraba que lo esencial era la transmisión de conocimiento. Dictaba clases todos los semestres y más de una materia simultáneamente. A mi promoción dictó Mecánica Racional, Mecánica de Fluidos, Mecánica Estadística, Física Cuántica, Introducción a la Física del Sólido, Introducción a la Física Nuclear, Electrodinámica Cuántica y, posiblemente, alguna más. Asistía a los seminarios dados por algunos, pocos, visitantes y hasta hacía preguntas...yo no entendía nada pero, su presencia y participación, me transmitía orgullo y confianza.

Falleció en 1962 dejando su obra inconclusa y una joven familia: Covita, su Señora, y sus hijos Beatriz, Carlos, Mónica y Esteban, todos en edad escolar. Hoy todos profesionales...Covita era una mujer extraordinaria, digna esposa de Balseiro. No fue fácil para ellos y mi esposa, María Elena, y yo tuvimos el privilegio de considerarnos parte de la familia.

Carlos se licenció en Física en el Instituto y se doctoró en 1978. Dos excepcionales físicos fueron sus padrinos de tesis, efectivos, Blas Alascio y Arturo López Dávalos. Ambos físicos teóricos reconocidos, con modalidades sutilmente diferentes y complementarias en la forma de transmitir el sentimiento de la física. Ellos le entregaron a Carlos una muy buena formación.

La excelente base de Carlos se amplió al ser recibido como posdoctorado por el más reconocido científico (ahora se suma Maldacena) del Instituto Balseiro, Leo Falicov, profesor en Berkeley. Después de un par de años Carlos regresa a Bariloche, al grupo de Física Teórica. Su participación en el grupo contribuye y refuerza, desde entonces, el reconocimiento de problemas importantes en la Física de Materiales.

Cuando la sociedad internacional se conmovió por el descubrimiento de la denominada Superconductividad de Alta Temperatura, en Suiza, la madurez y preparación de Balseiro y sus colegas teóricos se puso de manifiesto. Comprender los

procesos que dan lugar al fenómeno es problema aun no resuelto pero contó con la participación activa del grupo de Bariloche. El grupo estaba preparado.

Carlos ha dirigido alrededor de una decena de excelentes doctorados. Con ellos y con colegas teóricos y experimentales han penetrado en otro campo de alta repercusión internacional que complementa, no reemplaza, la profundización en el estudio de la materia. Se refiere al comportamiento de una nueva materia: sólidos y líquidos confinados a dimensiones muy pequeñas, las nano-estructuras. El conocimiento y el desarrollo de nuevas tecnologías asociadas a esa materia han abierto un campo tan vasto que puede compararse en profundidad y repercusión con aquel que desafía el conocimiento del universo...

Carlos tiene decenas de trabajos en revistas prestigiosas, ha dictado gran número de conferencias en Argentina, Latinoamérica, Estados Unidos y Europa.

Su padre debe estar satisfecho por su obra y por el camino que siguió Carlos.

Termino con una reflexión hacia nuestra sociedad, su dirigencia y la concepción institucional de la ciencia y técnica: Es sano y bueno que las personalidades como Carlos tengan lugar, tiempo y recursos para liderar la generación de conocimiento. Es indispensable que las instituciones tengan directivos con el conocimiento y aptitud necesarios para reconocer la excelencia y así discriminar lo bueno, lo mejor y diferenciarlo de lo superfluo para que, de esa forma, se administre con recursos magros pero justos las necesidades de aquellos que son capaces de crear y difundir el conocimiento en su sociedad. Esa actitud no debe interpretarse como privilegio sino como inversión indispensable que se otorga como contraparte del compromiso de aquel que es capaz de dirigir y orientar la creación de conocimiento como cimiento de una sociedad más justa.

Presentación realizada el 26 de abril de 2013.

PRESENTACIÓN DEL DR. RUBÉN ZAMAR COMO ACADÉMICO CORRESPONDIENTE EN VANCOUVER, CANADÁ

Víctor J. Yohai

Académico Titular de la Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales

Conocí al Dr. Zamar en el año 1981 cuando estando en Brasil, un colega argentino, profesor de Estadística de la Universidad de Pernambuco en Recife, me pidió que entrevistara a un profesor de su Departamento que no había completado sus estudios de doctorado para que eventualmente yo los dirigiera. Cuando le pregunté sobre su formación me dijo que era Contador de la Universidad de Córdoba y tenía un grado de Master de un año en el CIENES (Centro Interamericano para la Enseñanza de la Estadística) en Santiago de Chile.

Como le comenté que esta formación me parecía insuficiente para iniciar un doctorado que requería una formación matemática mucho más importante, el colega me respondió que Rubén Zamar tenía una capacidad Matemática inusual y que muy rápidamente iba a aprender todos los conocimientos que se requiriesen para hacer su tesis. Esto me convenció de hablar con Rubén y le propuse un posible tema de investigación, aconsejándole varias lecturas para que se familiarizara con el tema. Al poco tiempo de tratar a Rubén me convencí de que todos los comentarios del Profesor que me había recomendado a Rubén eran totalmente ciertos. Como en ese momento yo no tenía financiación para que viniese a hacer sus estudios de Doctorado en Buenos Aires, le solicité al Dr. Douglas Martin del Departamento de Estadística de la Universidad de Washington (con el cual yo colaboraba) que le otorgasen una beca para hacer sus estudios de doctorado en ese Departamento.

La tesis del Dr. Zamar fue publicada en una de las cuatro revistas más importantes de Estadística, *Biometrika*, y tiene como único autor a Rubén Zamar. Su director de tesis no quiso aparecer como autor ya que consideró que todas las ideas sumamente innovadoras que aparecían en ese trabajo eran mérito exclusivo de Rubén.

En efecto, en ese trabajo se calculaba por primera vez el sesgo asintótico de un estimador robusto para un modelo complejo. Esto inauguró un cambio importante de metodología para evaluar la robustez de estimadores. El concepto de sesgo asintótico ya se conocía anteriormente pero se pensaba que era demasiado complejo para ser calculado fuera de modelos muy simples como el modelo de posición.

Luego de completar su doctorado Zamar ingresó como “Assistant Profesor” en el Departamento de Estadística de la Universidad de British Columbia, en Vancouver, Canadá. Actualmente es “Full Professor” en esta Universidad y es considerado uno de los investigadores líderes en el mundo en el área de Estadística Robusta.

El Dr. Zamar también ha hecho contribuciones muy importantes en las áreas de Análisis de Conglomerado, Data Mining, Procesamiento de Imágenes, Selección de Modelos y Bootstrap. Su trabajo ha sido muy innovador y ha abierto nuevos enfoques para muchos de los problemas que él ha estudiado.

En su CV están listadas 70 publicaciones, muchas de ellas en los mejores revistas de Estadística, incluyendo 12 en el *Annals of Statistics*, 6 en el *Journal of the American Statistical Association*, 2 en *Biometrika*, 1 en el *Journal of the Royal Statistical Association*. Estas cuatro revistas son a mi juicio las de mayor prestigio para publicaciones en Estadística.

El Dr. Zamar ha dirigido 9 tesis doctorales, 14 tesis de Magister y 7 becarios postdoctorales. Muchos de sus estudiantes doctorales ocupan hoy importantes posiciones en el ámbito académico. Podemos mencionar al Dr. Marcelo Ruiz que es el actual Rector de la Universidad Nacional de Río Cuarto, al Dr. José Ramón Berrendero, actualmente Profesor Titular en la Universidad Autónoma de Madrid, al Dr. Matias Salibian Barrera, actualmente “Associate Professor” de la University of British Columbia y a la Dra. Gabriela Cohen Freue que es Assistant Professor en la misma Universidad. El Dr. Zamar dirige actualmente tres tesis doctorales, una de ellas en la Universidad de Buenos Aires.

El Dr. Zamar ha sido Editor Asociado de revistas muy importantes, entre las que podemos citar las antes mencionadas *Annals of Statistics* y el *Journal of the American Statistical Association*. También ha sido miembro del Comité Científico y Conferencista Invitado de numerosas conferencias en su campo.

El Dr. Zamar ha recibido muy importantes distinciones, entre las cuales podemos citar el “Best Paper Award” en 2001 (el mayor premio en el campo de Data Mining), el “2001/02 Science Research Achievement Awards”, en la University of British Columbia y la distinción “Cátedra de Excelencia” otorgada por la Universidad Carlos III de Madrid, España.

El Dr. Zamar ha mantenido una colaboración muy prolífica y continuada con investigadores argentinos. Además de haber colaborado conmigo en numerosos trabajos, también trabajó con la Dra. Graciela Boente de la Universidad de Buenos Aires, con el Dr. Jorge Adrover de la Universidad Nacional de Córdoba y con el Dr. Ricardo Fraiman de la Universidad de San Andrés. Ha dictado numerosos cursos en la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la UBA para alumnos de la Licenciatura y Doctorado en Matemáticas y para la Maestría en Estadística Matemática.

Además de las cualidades académicas del Dr. Zamar, quiero destacar su inmensa generosidad para compartir sus ideas. Cuando el Dr. Rubén Zamar genera una nueva idea, por más novedosa e importante que sea, inmediatamente ofrece trabajar en la misma a colegas y alumnos, haciéndolos de esta manera participar de su reconocimiento posterior. Es de señalar que en Estadística como en Matemática, a diferencia de otras ciencias, no existe el concepto de principal autor de un trabajo. Lo habitual es firmar los trabajos en orden estrictamente alfabético de manera que no se dejan rastros de quien es el principal autor o el generador de las ideas.

Por todo esto es para mi un gran honor y alegría presentarles al nuevo Académico Correspondiente, Dr. Rubén Zamar.

Presentación realizada el 28 de junio de 2013.

PRESENTACIÓN DEL DR. ALEJANDRO FAINSTEIN COMO ACADÉMICO CORRESPONDIENTE EN SAN CARLOS DE BARILOCHE

Francisco de la Cruz

Académico Titular de la Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales

Agradezco a la Academia el privilegio que me ha otorgado de presentar a un distinguido investigador y educador. La actividad de Alex Fainstein es importante, tanto por sus logros en la ciencia básica y aplicada como por la formación de investigadores de alta calidad.

No describiré aspectos científicos que motivaron su incorporación a esta Academia. Lo hará Fainstein dentro de unos minutos.

La presentación de Alex en este importante acto motivó recuerdos y reflexiones sobre acontecimientos que, en el transcurso de la vida, me permitieron ser testigo y/o participe de acciones que en algunos casos estuvieron asociadas al progreso y en otros al atraso del quehacer científico en Argentina.

La mayor parte de mi vida profesional transcurrió en Bariloche y se superpuso con una gran parte de la vida de Alejandro. Empezando por los orígenes de Alex mencionaré que tanto sus padres como mi esposa y yo fuimos testigos de esa aventura que se había iniciado en 1955 en Bariloche. El papá, Carlos, estudió en el hoy Instituto Balseiro y se convirtió en uno de los pioneros que construyeron el laboratorio de investigación de propiedades de materiales basado en el uso de técnicas de Resonancia Magnética.

Alex se licenció en Física en el Instituto Balseiro. Escogió hacer su tesis doctoral en el Centro Atómico Bariloche en el laboratorio de Resonancias Magnéticas y su tesis fue presentada en el Instituto Balseiro (IB) en 1992, bajo la dirección de Manuel Tovar.

Usualmente, al finalizar la tesis doctoral ampliamos nuestra capacitación en algún lugar donde se refuerce el conocimiento adquirido previamente. Este no es el caso de Alex Fainstein. Buscó trabajo posdoctoral en un área de vacancia en el Centro Atómico Bariloche y, por cierto, escasa por entonces en el país: la investigación de la materia condensada, estudiando la respuesta de la estructura microscópica de los materiales al ser expuestos a la presencia de "luz". Arma de importancia tanto para indagar la estructura íntima de los materiales como para desarrollar tecnologías de avanzada.

Alex aceptó un puesto posdoctoral en 1993 en el Laboratorio de Propiedades Ópticas dirigido por Manuel Cardona, por entonces uno de los Directores del Instituto Max Planck en Stuttgart. Dio comienzo allí a una carrera exitosa poniendo de manifiesto su capacidad intelectual y su efectividad en el quehacer científico.

Si en su cabeza estaba regresar algún día a Bariloche, esta decisión era atrevida. Era consciente de que no había infraestructura instalada en esa área importante de la física. Es por ello que me pareció oportuno describir mi visión sobre actividades de hechos en los que Alex no sólo se muestra como destacado científico sino también como persona que toma decisiones de riesgo en forma exitosa.

Hago un paréntesis para describir concisamente características del Instituto de Física de Bariloche después de su fundación y hasta la época en que Alex terminó de hacer su doctorado.

Es innecesario describir las tristes circunstancias que han conducido a nuestro país a dolorosos enfrentamientos. En demasiadas ocasiones la intransigencia e irracionalidad han llevado a diásporas de científicos y con ello la destrucción de líneas de trabajo en diversos centros de generación de conocimiento.

La lejanía de fuentes de decisión político-administrativa era un hándicap del CAB-IB para obtener recursos dedicados al desarrollo de la investigación. Por otro lado, las repetidas acciones que

llevaron a la destrucción de grupos y centros de investigación en el país se vivió atenuada en Bariloche. El desarrollo de las áreas de investigación se hizo a través de una difícil y lenta adquisición de equipamiento y, muchas veces, gracias a la creatividad del personal que tomaba a su cargo tanto el diseño como la construcción. El resultado fue el crecimiento lento pero estable de los grupos de investigación, originados durante la vida de Balseiro. Esta moderada estabilidad en el tiempo tenía su aspecto negativo, era difícil imaginar la creación de nuevas áreas de investigación. La falta de previsibilidad económica hacía difícil concebir la creación de nuevos grupos sin poder asegurar la oferta de trabajo para atraer a especialistas en el área a desarrollar.

En la década de los 80 el CONICET presidido por Abeledo estimuló la creación de nuevas infraestructuras (LANAIS) en el país. También, alrededor de esa época, pudimos contar con la decisión del Director del CAB, López Dávalos, y el apoyo de Mariscotti, Jefe de Investigación de la CNEA, para lanzar un estudio de desarrollo de nuevos proyectos, con el requisito de analizar qué equipamiento podría desarrollarse dentro del país. Personal de INVAP fue el encargado de elaborar el programa e hizo un detallado e interesante análisis de propuestas. Entre otras, la creación de un laboratorio dedicado al estudio de propiedades ópticas de los materiales, y la puesta en marcha del crecimiento de modernos materiales por Molecular Beam Epitaxial. Este proyecto tenía en cuenta la posibilidad de reintegrar al país especialistas de reconocido prestigio residentes en el exterior.

Lamentablemente el esfuerzo realizado no pudo concretarse. Pasó un prolongado período de tiempo hasta poder imaginar que, parcialmente, se podía concretar algunos de esos proyectos.

Fainstein finalizaba su posdoctorado en el Max Planck en 1994 y tuvo una oferta para trabajar en France-Telecom utilizando su experiencia adquirida en Alemania. Durante su estadía en ese país, otro ex-alumno del IB y amigo de Fainstein, Pablo Etchegoin, completaba su doctorado en el Max Planck de Stuttgart bajo la dirección de Manuel Cardona, en un campo de investigación afín al de Alex. En 1994 aceptaba un posdoctorado en Cambridge.

Los dos, Pablo y Alex, se incorporan al Centro Atómico Bariloche a partir de 1996, donde se los esperaba para fundar el tan esperado laboratorio de Espectroscopía Óptica. Se reúnen fondos de distintas procedencias, públicas y privadas, y dan comienzo a un febril trabajo de construcción de un laboratorio simultáneamente acompañado por la formación de jóvenes licenciados y la colaboración con un gran número de investigadores del país y del extranjero. La eficiencia del desarrollo del proyecto fue extraordinaria y al poco andar se inicia la producción científica que da lugar a publicaciones en prestigiosas revistas internacionales y la licenciatura y doctorado de un notorio número de estudiantes. En el año 2000 el laboratorio era reconocido internacionalmente y habían producido decenas de publicaciones con colaboradores locales e internacionales. Según Manuel Cardona "... empezaron a aparecer trabajos importantes del grupo Etchegoin-Fainstein y Bariloche se convirtió quizás en el centro más importante del Cono Sur en el campo de espectroscopia óptica de sólidos".

Lamentablemente Pablo decidió alejarse de Bariloche (1999), en parte como consecuencia del trato improcedente de una autoridad de la CNEA que manifestó en público la poca "utilidad" del trabajo que allí se realizaba. Inmediatamente fue acogido por el Imperial College, en Inglaterra, y poco tiempo después aceptó una oferta como profesor y director de un grupo de investigación en Nueva Zelandia.

El trabajo hecho en colaboración con Alex en Bariloche seguramente influyó en la rápida oferta de trabajo para Pablo Etchegoin. Con el paso de los años Pablo ha tenido éxito como científico reconocido en todo el mundo y formador apreciado por muchos alumnos. En 2010 Pablo fue nombrado académico de la Real Academia de Nueva Zelandia.

La pérdida del excelente colaborador no amilanó a Fainstein, que con gran eficiencia y eficacia convirtió en poco tiempo a su laboratorio en un centro reconocido internacionalmente, tanto por el impacto de los trabajos realizados como por la calidad sobresaliente de los estudiantes que ha formado. Desde los comienzos del laboratorio Alex fue muy demandado por estudiantes del IB para hacer su maestría y

doctorado. Su impacto se hace evidente por el gran número de colaboraciones con investigadores de diversos países, el impacto de alrededor de 150 publicaciones y su asistencia, por invitación, a un gran número de escuelas y conferencias internacionales. Ha formado más de media docena de doctores en física y un número mayor de maestrías, varios de los cuales son hoy colaboradores independientes.

Su interés por las nano-estructuras y el estudio de sus propiedades combinadas de luz y sonido lo han convertido en un especialista reconocido internacionalmente.

Un aspecto destacable es su capacidad didáctica y su interés tanto por temas de investigación básica como por su entusiasmo por el desarrollo y uso de tecnología de avanzada en proyectos de palpable interés tecnológico. Es por esta característica que es reconocido como atractor de excelentes estudiantes con orientaciones y preferencias que van desde la investigación pura hasta la aplicación de tecnologías de avanzada, todo ello en un ambiente de convivencia donde la generación y la aplicación del conocimiento se entrelazan entre sus participantes.

Presentación realizada el 30 de agosto de 2013.

PRESENTACIÓN DEL DR. MARIO BUNGE COMO ACADÉMICO HONORARIO EN MONTREAL, CANADÁ

Horacio C. Reggini

Académico Titular de la Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales

En abril de 2013, con un grupo de colegas propusimos la designación de Mario Augusto Bunge como Miembro Académico Honorario de la Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales. Sabíamos que este nombramiento no era importante frente a los numerosos y merecidos reconocimientos por sus trabajos y larga vida, pero consideramos que esa designación era además una especie de prueba de respeto, del afecto y cariño que muchos sentimos por él.

Mario Bunge, nacido en Buenos Aires en 1919, es físico y filósofo de las ciencias naturales y sociales. Desde 1966 es profesor en McGill University de Montreal, decana de las universidades canadienses.

El campo que ha proyectado a Bunge al plano más elevado en su carrera ha sido el de la filosofía de la ciencia y de la tecnología, según lo comento expresamente en mi libro reciente *La enseñanza de la ingeniería en el siglo XXI*.

En 1982 fue galardonado con el Premio Príncipe de Asturias de Humanidades. Bunge ha propuesto un sistema filosófico ampliamente reconocido en el mundo académico, que comprende aportes en ontología, gnoseología, semántica, lógica y ética. Sus contribuciones en filosofía y estrategias de investigación son de gran influencia en la comunidad científica y filosófica.

Sus obras más recientes son: *Crisis y reconstrucción de la filosofía* (2002), *Emergencia y convergencia. Novedad cualitativa y unidad del conocimiento* (2003), *A la caza de la realidad* (2006), *Filosofía y sociedad* (2008), dos volúmenes de su obra *Tratado de filosofía. Semántica I y Sentido y referencia* (2008), *Tratado de filosofía. Semántica II: interpretación y verdad* (2009), *Las pseudociencias* (2010) y *Filosofía de la tecnología y otros ensayos* (2012). En este último –editado por el Fondo Editorial de la Universidad Inca Garcilazo de la Vega, Lima, Perú– define con notable precisión y profundidad aspectos de la ciencia, la técnica y la ingeniería en el panorama general del siglo XXI. Su obra frontal *Treatise on Basic Philosophy* consta de ocho tomos.

Pero no voy a extenderme más en sus cualidades científicas, técnicas y filosóficas, sino que deseo comentar cuestiones más personales.

Mario Bunge nunca ha sido un científico o un filósofo cuya máxima aspiración fuese hacer tan solo ciencia o filosofía; le ha importado siempre ver qué pasa por su ciudad y el mundo, es una persona muy civil, con mucho interés en que lo público sea mejor. Tiene un fuerte entusiasmo por las cosas bien hechas, las bibliotecas, la educación, los gobiernos... Se enfada cuando ve que las instituciones no funcionan como tienen que funcionar, cuando los periódicos no se comportan como deben. Siempre brinda discursos muy comprometidos con todo lo que debiera ser y aporta entonces una contribución a la conversación general.

En los Estados Unidos, los escritores tienen una presencia mínima muy escasa en el debate público. En Francia, el escritor tiene una actitud bastante más arrogante. En España, muchísima gente que se dedica a la literatura ha participado activamente en los debates, y de hecho es muy frecuente allí que escriban opinión. Depende de cada cual, pero es

una larga y noble tradición. Ejercen la libertad de expresión y pueden ser escritores de una manera natural.

Mario Bunge, para una nota o una entrevista para un diario, se pone entero, con todo su rigor, con toda su atención a lo que dice o escribe.

Creo que eso se da en todos los grandes, esa idea de que uno no debe bajar la guardia; se trata de dedicar atención absoluta, poner el máximo rigor en aquello que se está haciendo.

Ya que todos trabajamos con las palabras, uno de los cuidados fundamentales es no dejar que las palabras mientan; es cuidar, restaurar el sentido de las palabras.

Es que el lenguaje está sometido de continuo a degradación por motivos políticos, ideológicos o económicos, y una parte del trabajo ciudadano es recuperar el sentido de las palabras, que cuando se diga pan, se diga pan y sea pan. Es cuestión de resistirse y de reafirmar sin bajar la guardia.

Y ese es el estilo de Mario Bunge. El estilo por el que lo han premiado muchas veces. No se lo ha premiado solo por sus obras, sino también su manera de hacer.

Presentar a Mario Bunge, en nombre de la institución a la que se incorpora, es una invitación a reflexionar sobre el carácter de los hombres científicos y sobre el denuedo y las convicciones con las cuales el carácter impregna la acción. Puedo en este día realizar esa tarea a la luz de una vida que se ha desplegado con voluntad de servicio cívico. La han regido, por un lado, los principios inmutables de su personalidad, y por otro, los imponderables que asaltan a los contemporáneos.

Llaman la atención los ámbitos en los cuales Bunge ha respondido a las condiciones que debía satisfacer. No siempre ellas se encarnan con la debida disciplina y templanza moral en los protagonistas de una época.

Mario Bunge ha estado siempre atento a numerosos contextos. Se ha preparado para hacerse cargo de las responsabilidades que emanan de la idea de liderazgo, y lo ha hecho con clara identificación de los valores asociados a la promoción del desarrollo individual y social y a la necesidad de contar con las instituciones indispensables para canalizarlos y fortalecerlos.

Bunge dio, al abandonar el país, la manifestación de autenticidad que él pedía. Se abriría entonces su extensa etapa en el extranjero.

Agradecemos a Mario Bunge nuevamente su aceptación a la designación de Miembro Académico Honorario de nuestra Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, por su saber, su ejemplaridad, y su decencia; y nos preparamos ahora para escuchar su conferencia titulada “El efecto Bohm-Ahronov”.

Presentación realizada el 25 de octubre de 2013.

PRESENTACIÓN DE LA DRA. CATHERINE CESARSKY COMO ACADÉMICA CORRESPONDIENTE EN PARIS, FRANCIA

Héctor Vucetich

Académico Titular de la Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales

Es un honor y un placer para mí el haber sido designado para presentar a la Doctora Catherine Cesarsky que hoy se incorpora como nuevo Académico Correspondiente.

La Dra. Cesarsky obtuvo su título de Licenciada en Física en la UBA, en 1964, trabajó durante un tiempo como becaria en el IAR (Instituto Argentino de Radioastronomía) y posteriormente se trasladó a Harvard, USA, para lograr su grado de *PhD in Astronomy*.

¿Cómo resumir una carrera tan completa y exitosa en pocas palabras? Porque la Dra. Cesarsky es una investigadora muy completa en Astronomía, que le ha dado renombre internacional. Su especialidad principal es la Astronomía Galáctica y Extragaláctica, aunque también visitó otras especialidades tales como estructura estelar y astrofísica de rayos cósmicos.

La Dra. Cesarsky ha investigado en muchos campos de la Astronomía Teórica, Instrumental y Observacional, principalmente en Astrofísica de Altas Energías y en el Infrarrojo. En particular, mencionemos los proyectos GOODS con su subproyecto ISOCAM, que han proporcionado una valiosa información sobre los catastróficos orígenes del Universo en que vivimos.

Aunque las acciones de las personas no se miden con números, el citarlos permite decir muchas cosas en pocas palabras. La Dra. Cesarsky ha publicado más de 160 trabajos en revistas científicas líderes, que suman más de 10.000 citas, y el *índice h* correspondiente es $h = 56$. Anecdóticamente, algunos de estos trabajos fueron realizados en colaboración con nuestro Académico Correspondiente Dr. Félix I. Mirabel.

Uno de los problemas más grandes en la Astronomía moderna es la necesidad de desarrollar complejos proyectos, que involucran muchos investigadores, ingenieros y técnicos así como una sofisticada infraestructura en instrumental e informática. La coordinación de dichos proyectos es una tarea titánica y la Dra. Cesarsky se ha destacado también allí. Entre sus actividades ha sido Directora del Service d'Astrophysique de la Comisión de Energía Atómica de Francia (CEA), Directora de la Direction des Sciences de la Matière, Directora General del European Organisation for Astronomical Research in the Southern Hemisphere (ESO) y Alto Comisario del CEA entre otros cargos.

La Dra. Cesarsky ha recibido varios reconocimientos a su labor científica, entre los que podemos mencionar el *COSPAR Space Science Award* (1998), el *Prix Janssen de la Société Astronomique de France* (2009) y el Doctorado *Honoris Causa* por la Universidad de Ginebra (2010).

Permítanme terminar esta presentación dando la bienvenida a esta institución a la Académica Correspondiente Dra. Catherine Cesarsky.

Presentación realizada el 14 de noviembre de 2013.

PRESENTACIÓN DE LA DRA. SANDRA M. DÍAZ COMO ACADÉMICA CORRESPONDIENTE EN CÓRDOBA

Enrique J. Baran

Académico Titular de la Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales

Se incorpora hoy a nuestra Academia, como Académica Correspondiente en la ciudad de Córdoba, la Dra. Sandra Myrna Díaz y agradezco a los colegas de la Sección de Ciencias Químicas de la Tierra y Biológicas y de la Mesa Directiva el haberme designado para hacer su presentación, situación que constituye para mí un gran privilegio y placer personal dado que más allá de que la recepción de un nuevo miembro de la Academia siempre es un acto emotivo, gratificante y trascendente, pues permite poner de relieve los logros y méritos personales y científicos de una nueva colega, en este caso particular estamos recibiendo a una personalidad que se ha constituido ya en una figura referencial en el campo de la Ecología, tanto a nivel nacional como internacional.

Sandra Díaz se recibió de Bióloga (1984), Profesora en Ciencias Biológicas (1985) y Doctora en Ciencias Biológicas (1989) de la Universidad Nacional de Córdoba. Ha ocupado cargos docentes en esa Universidad desde 1985, siendo en la actualidad Profesora Titular de la Cátedra de Ecofisiología de Comunidades y Ecosistemas (Facultad de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales). Desde 1993 pertenece a la Carrera del Investigador Científico del CONICET, siendo en la actualidad, y desde 2006, Investigadora Principal, desempeñándose también como Directora del Núcleo DiverSus de Investigaciones sobre Biodiversidad y Sustentabilidad (CONICET-U.N. de Córdoba).

Realizó su formación posdoctoral en la Universidad de Sheffield (Inglaterra) como becaria del CONICET (1991-93), donde con posterioridad realizó otras breves estancias de trabajo. Asimismo, realizó otras estancias de trabajo y actividades académicas en la Universidad de Sonora, México (1997), en el New Zealand Pastoral Agriculture Research Institute (1998), en la Hebrew University de Jerusalén (1999), en la University of Alaska at Fairbanks (2000), en el CNRS de Montpellier, Francia (2001), en la Stanford University (2002-2003), en la Universidad de Palmeston North, Nueva Zelanda (2003), en la Universidad Joseph Fourier de Grenoble (2006), en la Universidad de Ciudad del Cabo (2008), en la Universidad de Wageningen, Holanda (2010) y, más recientemente, como Profesor Visitante, en la School of Geography and the Environment de la Universidad de Oxford, Reino Unido.

A través de su actividad científica, Sandra Díaz ha jugado un papel importante en el desarrollo del concepto de biodiversidad funcional, que constituye un enfoque novedoso y no tradicional (más práctico y universal) para la comprensión y el manejo de la biodiversidad. Y ha aplicado este concepto al estudio y al manejo de ecosistemas, bregando por su inclusión como tema prioritario en agendas científicas internacionales relacionadas a los cambios globales, logrando establecer fuertes interrelaciones entre la biodiversidad funcional, las propiedades de los ecosistemas, y los cambios globales y su impacto social. Por otra parte, junto a colegas de diversos lugares del mundo, ha realizado valiosas y novedosas experiencias de campo que permitieron extender notablemente diversos conocimientos sobre los ecosistemas reales, así como sobre las herramientas más adecuadas para su manejo.

Asimismo, ha establecido un sólido grupo de investigación en el Instituto Multidisciplinario de Biología Vegetal (Universidad Nacional de Córdoba-CONICET) que ha sido pionero en el estudio de las respuestas de vegetales a los cambios globales, en el área de

América Latina, desarrollando también una base de datos sobre esta temática para toda la región. A lo largo de su actividad ha demostrado reiteradamente que es capaz de producir no sólo resultados novedosos que abren nuevos horizontes y perspectivas, sino que ha tenido también la capacidad y la energía necesarios para reunir en torno suyo a un importante grupo de colaboradores alrededor del mundo, para encarar desafíos que por su envergadura y complejidad son imposibles de abordar por un solo individuo o grupo. Estas acciones la transforman, indudablemente, en una figura de referencia, en una líder científica destacable, y fuente de inspiración constante para científicos jóvenes, así como en una Maestra con indudable impacto y trascendencia.

Como resultado de sus trabajos, ha generado más de 120 publicaciones científicas, muchas de ellas en revistas relevantes como *Nature*, *Plant Biology*, *Trends in Ecology & Evolution*, *Global Change Biology*, *Journal of Biogeography*, *Proceedings of the National Academy of Sciences, USA*, etc. Ha presentado también numerosas comunicaciones a congresos y reuniones nacionales e internacionales, participando también en los Comités editoriales de varias publicaciones internacionales de su especialidad. Asimismo, lleva dirigidos más de diez trabajos de Tesis Doctoral y numerosas Tesinas de Grado.

Sandra Díaz ha recibido también una importante cantidad de distinciones y premios nacionales e internacionales siendo especialmente destacable el mencionar que en 2007 recibió, junto a todos los participantes activos del Panel Intergubernamental sobre Cambio Climático, el Premio Nobel de la Paz y que en 2009 fue incorporada como Miembro Asociado Extranjero a la Academia Nacional de Ciencias de los EEUU, siendo la primera mujer argentina en recibir esa distinción. La misma Academia le había otorgado también, el año anterior, el prestigioso Premio Cozzarelli. Asimismo, en 2002 había sido Guggenheim Fellow de la John S. Guggenheim Memorial Foundation. Por otra parte, en 2010 fue incorporada a la Academia Nacional de Ciencias en Córdoba y a The World Academy of Sciences (TWAS) y hace unos días fue galardonada con el importante Premio Konex de Platino, en Biología y Ecología, instituido por la Fundación Konex.

Si bien esta presentación solo da una idea muy aproximada y, en algunos aspectos, muy resumida e incompleta, de los extensos e impactantes antecedentes de nuestra nueva Académica, creo que ha quedado totalmente claro lo valioso que puede ser para nuestra corporación tenerla de ahora en más entre sus miembros. Por ese motivo, me permito decir: Bienvenida Dra. Díaz a nuestra Casa que ahora también es la suya y esperamos sinceramente poder contar en forma continuada con sus conocimientos, ayuda y asesoramiento.

Presentación realizada el 29 de noviembre de 2013.

III

ENTREGA DE LOS PREMIOS "ACADEMIA NACIONAL DE CIENCIAS EXACTAS, FÍSICAS Y NATURALES"

- AÑO 2013 -

APERTURA DEL ACTO DE ENTREGA DE PREMIOS DEL AÑO 2013

Roberto L.O. Cignoli

Presidente de la Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales

Esta Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales es una de las más antiguas entidades argentinas en su tipo, pues tiene su origen en la Academia de Matemática creada el 26 de marzo de 1874, fecha en que se dicta el decreto que determina la constitución y funcionamiento de los cuerpos que formarán la Universidad de Buenos Aires. Su primer Presidente fue Juan María Gutiérrez, que había sido Rector de la Universidad hasta el año anterior.

Medio siglo después, el 16 de junio de 1926, adquiere autonomía como institución civil con sus propios estatutos y disposiciones reglamentarias sancionados por el Gobierno Nacional y adquiere su actual estructura.

Por imposición legal, las academias nacionales pueden tener como máximo 40 miembros titulares, que tienen la responsabilidad de su conducción y no pueden percibir ningún tipo de retribución económica por las tareas desempeñadas como académicos.

Por lo tanto la función de la Academia no es la investigación científica, la que es realizada por sus miembros en las universidades e institutos de investigación estatales o privados, sino *propender al adelanto, desarrollo y difusión de las ciencias exactas, físicas y naturales y de sus tecnologías, con el objeto de contribuir al progreso de la Nación*, como reza en su Estatuto.

Para cumplir con estos fines la Academia ha implementado programas para contribuir al mejoramiento de la enseñanza de las ciencias por medio de cursos y talleres destinados a profesores de enseñanza media y a maestros de escuela primaria, ha organizado conferencias de divulgación sobre temas científicos, ha publicado estudios sobre cuestiones de acuciente interés social como el agua y la energía, otorga becas para estudios de grado y de posgrado. La Academia también sostiene, conjuntamente con el CONICET, el *Instituto de Botánica Darwinion*, Los interesados podrán encontrar los detalles de estas actividades en nuestra página de Internet.

Otra actividad importante es premiar la labor de los científicos que trabajan en nuestro país en algunas de los temas vinculados con las tres secciones que integran la Academia:

- Sección de Matemática, Física y Astronomía.
- Sección de Ingeniería.
- Sección de Ciencias Químicas, de la Tierra y Biológicas.

Los premios anuales se vienen otorgando sistemáticamente desde 1992. A partir de 2006 se dividieron en dos categorías: Premios Consagración y Premios Estímulo.

Los Premios Consagración reconocen los logros y el esfuerzo de una vida dedicada al desarrollo de la ciencia. Este año corresponden a Astronomía, Ciencias de la Ingeniería y Ciencias de la Tierra.

Los Premios Estímulo reconocen la labor que están realizando los investigadores más jóvenes, de los que se espera una fructífera continuidad en sus carreras científicas.

Se aprovecha también la ocasión para recordar a personalidades que jugaron un importante papel en el desarrollo científico de nuestro país, asociando anualmente sus nombres a los premios estímulo.

Así este año el **Premio en Innovación Tecnológica** lleva el nombre del Ingeniero Félix J. Lilli. El Ingeniero Lilli fue un especialista en la construcción vial, profesor universitario distinguido, profesional de destacada actuación en organismos estatales y empresas privadas. Fue miembro titular de nuestra Academia hasta su fallecimiento.

El Premio en **Ciencias de la Ingeniería** lleva el nombre del Ingeniero Alberto S. Fava. El Ingeniero Fava fue maestro de ingenieros, gestor de aportes esenciales a la tecnología constructiva nacional a partir de sus estudios acerca de las aplicaciones del hormigón, asesor en obras viales e hidroeléctricas de gran envergadura. Falleció a los 98 años, dejando una huella trascendente de capacidad, prestigio y compromiso con los desafíos de su tiempo.

El **Premio en Matemática** lleva el nombre del Dr. Julio Rey Pastor. La llegada del matemático español Julio Rey Pastor en 1919 marcó el inicio del desarrollo de la matemática en la Argentina. Sus seminarios despertaron vocaciones y sus libros, escritos en un pulido castellano, fueron utilizados por generaciones de estudiantes en las universidades de habla hispana.

El Premio en **Física** lleva el nombre del Dr. Andrés Kálnay. Nacido y formado en la Argentina, los avatares políticos de nuestro país hicieron que el Dr. Kálnay se radicara en Venezuela. Sus contribuciones cubren una amplia gama de temas de física teórica, física matemática y matemáticas puras y ha sido formador de discípulos en Argentina, Perú y Venezuela.

El **Premio en Astronomía** lleva el nombre del Dr. Félix Aguilar, quien dirigió la Estación Astronómica Oncativo, en Córdoba, y fue director del Observatorio Astronómico de La Plata entre 1919 y 1921 y desde 1934 hasta su muerte. En 1935 creó la primera Escuela de Astronomía y Geodesia del país en la Universidad Nacional de La Plata, de donde salieron astrónomos para el Observatorio Nacional Argentino (ONA) a partir de la década de 1940, discípulos que impulsaron el estudio de la astronomía. Estableció allí un método riguroso de trabajo que prestigió a la astronomía argentina.

El Premio en **Ciencias Químicas** lleva el nombre del Dr. Pedro J. Aymonino. La incansable y continuada labor científica y docente del Dr. Aymonino generó un profundo y duradero impacto en la forma de enseñar y trabajar en la Química Inorgánica y fue el maestro y orientador de varias generaciones de investigadores y docentes en esa disciplina. La trascendencia, calidad e impacto de su labor hacen que deba ser considerado como el padre de la moderna Química Inorgánica de nuestro país.

El Premio en **Ciencias Biológicas** lleva el nombre del Dr. Rosendo Pascual. El Dr. Pascual se especializó en el estudio de mamíferos fósiles e hizo importantes aportes tanto a nivel nacional como internacional. Uno de los descubrimientos más destacados fue el hallazgo en la provincia del Chubut del primer ornitorrinco fuera de Oceanía. Dejó un valioso legado: no solo sus aportes científicos sino también la formación de numerosos paleontólogos que hoy en día trabajan en distintos puntos del país y del mundo.

Finalmente, el Premio en **Ciencias de la Tierra** lleva el nombre del Dr. Pedro N. Stipanovic. Entre los muchos méritos del Dr. Stipanovic merecen destacarse la organización de la exploración uranífera en nuestro país, la formación de profesionales con experiencia en la

geología y explotación del uranio y la utilización de tecnologías modernas no empleadas en el país e incluso en América del Sur, como las primeras prospecciones aéreas.

Por supuesto estas brevísimas reseñas sólo pueden dar una somera idea del porque fueron elegidos. Por fortuna ahora hay disponibles muchos medios para que los interesados puedan ahondar en la vida y obra de estos hombres que dejaron una imborrable huella en desarrollo científico y tecnológico de nuestro país.

Muchas gracias por su presencia y atención.

Presentación realizada el 6 de diciembre de 2013.

PREMIOS

“Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales”

- Año 2013 -

PREMIOS CONSAGRACIÓN

“Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales”

Sección de Ingeniería: *Dr. Ing. Ricardo S. Sánchez-Peña*
ITBA-Instituto Tecnológico de Buenos Aires

Sección de Ciencias, Químicas, de la Tierra y Biológicas: *Dr. Luis A. Spalletti*
CIG-Centro de Investigaciones Geológicas (CONICET-UNLP), La Plata.

Sección de Matemática, Física y Astronomía: *Dra. Cristina H. Mandrini*
IAFE-Instituto de Astronomía y Física del Espacio, Buenos Aires.

PREMIOS ESTÍMULO

”Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales”

Sección de Ingeniería:

Premio Félix J. Lilli en Innovación Tecnológica: *Dr. Ing. Leandro A. Ramajo*
INTEMA, Facultad de Ingeniería U.N. de Mar del Plata
[Investigador Adjunto del CONICET; Jefe de Trabajos Prácticos, UNMdP]

Premio Alberto S.C. Fava en Ciencias de la Ingeniería: *Dr. Ing. Carlos A. Méndez*
INTEC, Facultad de Ingeniería Química, U.N. del Litoral, Santa Fe
[Investigador Independiente del CONICET; Profesor Titular, U.N. Litoral]

Sección de Ciencias Químicas, de la Tierra y Biológicas:

Premio Rosendo Pascual en Ciencias Biológicas: *Dr. Julián Faivovich*
Museo Argentino de Ciencias Naturales “Bernardino Rivadavia”.
[Investigador Independiente del CONICET; Profesor Adjunto, UBA]

Premio Pedro N. Stipanovic en Ciencias de la Tierra: *Dr. Francisco J. Prevosti*
Departamento de Ciencias Geológicas, FCEN, UBA.
[Investigador Independiente del CONICET; Profesor Adjunto, U.N. de Luján]

Premio Pedro J. Aymonino en Química: *Dr. Marcelo Marti*
INQUIMAE- Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA

[Investigador Adjunto del CONICET; Profesor Adjunto DE, UBA]

Sección de Matemática, Física y Astronomía:

Premio Julio Rey Pastor en Matemática: Dr. Pedro G. Massey

Departamento de Matemática, Facultad de Ciencias Exactas, U.N. de La Plata

[Investigador Independiente del CONICET; Profesor Adjunto DE, UNLP]

Premio Andrés Kálnay en Física: Dr. Hernán E. Grecco

Laboratorio de Electrónica Cuántica, FCEN, UBA

[Investigador Adjunto del CONICET; Profesor Adjunto, UBA]

Premio Félix Aguilar en Astronomía: Dr. Alberto D. Supanitzky

IAFE-Instituto de Física y Astronomía del Espacio, Buenos Aires

[Investigador Asistente del CONICET]

INFLUENCIA DEL ARCO MAGMÁTICO PROTOANDINO EN LA ACOMODACIÓN SEDIMENTARIA, LA FISIOGRAFÍA Y LAS CARACTERÍSTICAS DE LOS DEPÓSITOS DEL JURÁSICO SUPERIOR Y CRETÁCICO INFERIOR EN LA CUENCA NEUQUINA

Luis A. Spalletti

Centro de Investigaciones Geológicas (UNLP – CONICET),
Calle 1 N° 644, B1900TAC La Plata, Argentina.
E-mail: spalle@cig.museo.unlp.edu.ar

Resumen

Uno de los rasgos tectónicos de gran importancia en el desarrollo de la Cuenca Neuquina durante el Mesozoico es el arco magmático generado por subducción de la placa protopacífica en el margen occidental de Gondwana. Aunque el arco magmático ha contribuido con aportes clásticos a la Cuenca Neuquina, el registro sedimentario de amplias áreas muestra que los detritos han derivado de otros terrenos, en particular el Macizo Norpatagónico, el Sistema de la Sierra Pintada y bloques intracuencales (como la Dorsal de Huincul). En esas regiones los suministros desde el arco magmático se reducen a materiales eólicos. Aún cuando es difícil reconstruir el margen occidental de la cuenca, circundante al arco magmático, a causa de la tectónica andina, depósitos sedimentarios del Jurásico Tardío y Cretácico Temprano ubicados en el sector occidental de la depresión preservan evidencias de procesos de acumulación y aportes detríticos vinculados con el crecimiento del arco magmático. Este registro muestra que las corrientes gravitacionales procedentes del arco magmático fueron importantes, pero no alcanzaron grandes extensiones hacia el interior de la Cuenca Neuquina debido a la influencia de la tectónica sobre la fisiografía y la generación diferencial de acomodación sedimentaria. Revela asimismo que las pendientes eran empinadas en este flanco occidental de la cuenca y que en cortas distancias se pasaba desde áreas fuertemente positivas (el arco) al eje del depocentro. En cambio, los gradientes eran menores en los sectores relacionados con los márgenes del interior continental, así como fueron extensas las distancias entre el borde y el eje del depocentro. La cuenca muestra entonces una fuerte asimetría en la generación de acomodación, puesta de manifiesto por la distribución regional de los espesores sedimentarios, los que alcanzan máximos valores en las sucesiones cercanas al arco magmático. La importante subsidencia que se registra en estos sectores se atribuye aquí a la compensación flexural isostática como respuesta a la carga topográfica y dinámica que produjo el desarrollo del arco magmático. Se concluye así que en la Cuenca Neuquina los procesos de generación de espacios para la acumulación de sedimentos fueron complejos. Además de la subsidencia térmica por enfriamiento cortical y la subsidencia mecánica por reactivación de fallas intracuencales debe considerarse especialmente la acomodación por flexura relacionada con la carga debida al crecimiento del arco magmático.

Palabras clave: Cuenca Neuquina, Jurásico Superior, Cretácico Inferior, arco magmático, subsidencia.

Abstract

Influence of the proto-Andean magmatic arc on the physiography, sedimentary accommodation and characteristics of Upper Jurassic-Lower

Cretaceous deposits of the Neuquén Basin, Argentina. One of the tectonic features of great importance in the development of the Neuquén Basin during the Mesozoic is the magmatic arc, generated by subduction of the proto-Pacific plate along the western margin of Gondwana. Although the magmatic arc has contributed with clastic input to the basin infill, the sedimentary record shows that large areas of the basin were supplied from other sources, particularly the North Patagonian Massif, the Sierra Pintada System and intrabasinal uplifted blocks (as the Huincul High). In these regions the contribution from the magmatic arc was essentially limited to wind blown materials. Although it is difficult to reconstruct the western margin of the basin surrounding the magmatic arc due to Andean tectonics, Upper Jurassic and Lower Cretaceous successions located in the western sector of the depression preserve evidence of sedimentary processes and detrital contributions linked to the growth of the magmatic arc. The slopes were steeper in this western flank of the Neuquén Basin and spent over short distances from uplands (arc) to the axis of the depocenter, and gravitational currents had a limited areal extent inland. Instead, gradients were lower in ample sectors of the basin related to cratonic margins. Therefore, the basin shows a marked asymmetrical pattern of accommodation space. Close to the arc basin successions are thickest, and arc loading is considered the main contributor to basin subsidence in these settings. The new compilation of Late Jurassic to Early Cretaceous information presented here helps to define that more than one process is required to explain the generation of accommodation in the Neuquén Basin. In addition to the thermal subsidence by cortical cooling and mechanical subsidence by reactivation of intrabasinal faults, flexural effects due to the load exerted by the growth of the magmatic arc should be especially considered.

Key words: Neuquén Basin, Upper Jurassic, Lower Cretaceous, magmatic arc, subsidence.

Introducción

La Cuenca Neuquina es una gigantesca depresión sedimentaria (con una superficie de más de 200.000 km²) que se ubica al este de la Cordillera de los Andes entre los 32° y 40° de latitud sur (Fig. 1A). Está limitada al este por dos áreas estables tectónicamente, el Sistema de la Sierra Pintada por el este y el Macizo Norpatagónico por el sudeste y sur. Entre el Jurásico inferior a medio y el Cretácico Temprano su flanco occidental lo constituía un arco magmático generado por la subducción de la placa protopacífica en el margen occidental activo de Gondwana [1, 2, 3]. De este modo, la acumulación de las sucesiones sedimentarias de aquellos tiempos se produjo en un contexto de tras-arco (Fig. 1B). El arco magmático no sólo constituyó un cuerpo tectónico de primer orden, sino que obró como una importante barrera topográfica a lo largo del límite occidental de la Cuenca Neuquina. Así, en períodos de ascenso eustático generalizado, el agua de mar penetró desde el oeste a través de diversos corredores labrados en el propio arco magmático (Fig. 1B), mientras que en períodos de descenso eustático, dichos pasos quedaron inactivos y la Cuenca Neuquina estuvo completamente dominada por procesos sedimentarios acaecidos en ambiente continental.

En este trabajo se discute la influencia ejercida por el desarrollo del arco magmático protoandino en la generación de espacio para la acumulación sedimentaria, en la paleogeografía y en los sistemas sedimentarios, y por ende en las características de los depósitos jurásico-cretácicos de la Cuenca Neuquina. Las interpretaciones se basan en investigaciones del autor, junto a diversos colegas, realizadas durante los últimos quince años y que han sido plasmadas en una serie de artículos que son citados en el texto.

Marco geológico

Las sedimentitas que constituyen las sucesiones jurásicas y cretácicas afloran con continuidad a lo largo del sector andino de la Cuenca Neuquina (Fig. 1A), desde la Alta Cordillera del norte de la provincia de Mendoza hasta la terminación austral de la cuenca bordeando al Macizo Norpatagónico. Estos depósitos también se presentan con amplia distribución en el subsuelo de la Cuenca Neuquina, tanto en el área andina como en la vasta región conocida como Engolfamiento Neuquino (Fig. 1A).

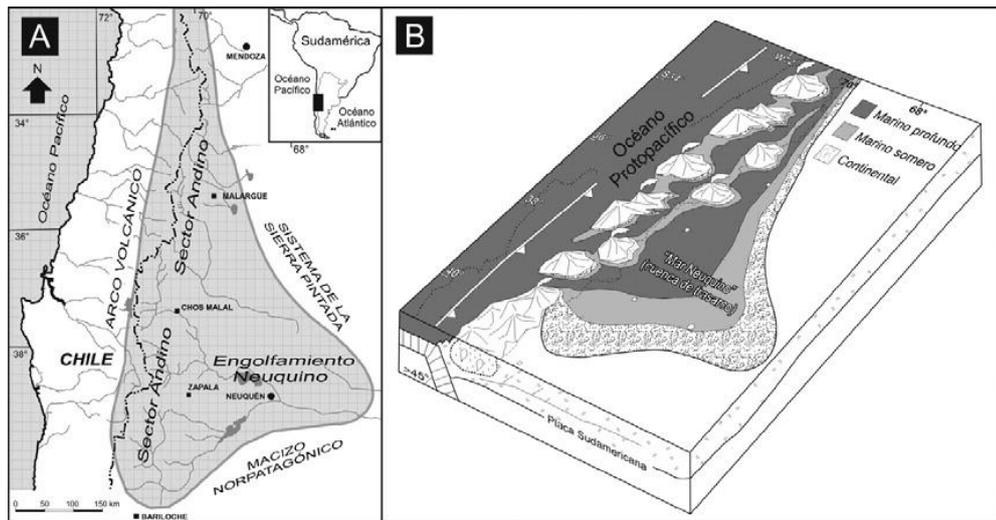


Fig. 1. Cuenca Neuquina. A. Ubicación, límites y sectores que la constituyen. B. Esquema paleotectónico y paleogeográfico general correspondiente a la fase de postrift (Jurásico – Cretácico Temprano), según [3].- 39 - L. A. Spalletti. *Premio Consagración ANCFN-2013*

El registro está conformado por sucesiones de muy diversa composición desde materiales silicoclásticos de variada granulometría hasta carbonáticos y evaporíticos. Estos depósitos sedimentarios reflejan la evolución ambiental y tectónica de la cuenca y son la evidencia de importantes cambios fisiográficos (Fig. 2). A partir de los trabajos pioneros de Groeber [4, 5] se ha determinado que las sucesiones jurásicas y cretácicas pueden ser agrupadas en ciclos de distinta jerarquía que aparecen limitados por discordancias regionales o por variaciones importantes en el régimen de sedimentación. Estos ciclos reflejan, en general, períodos transgresivos - regresivos y se relacionan con oscilaciones eustáticas globales combinadas con cambios de subsidencia y en el volumen de sedimentos aportados [6].

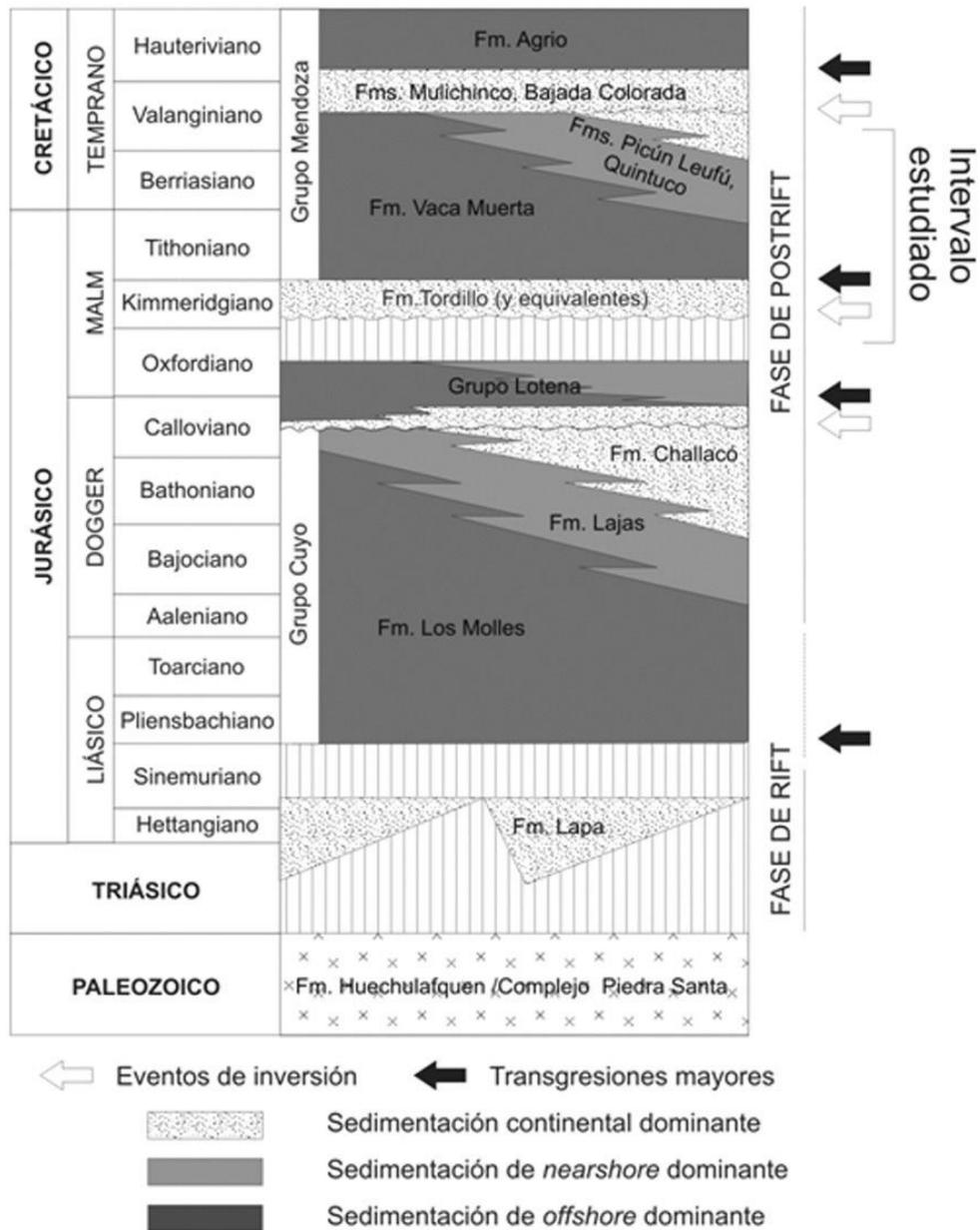


Fig. 2. Carta cronoestratigráfica de la Cuenca Neuquina austral para el lapso Triásico - Cretácico Temprano (modificada de [6] y [25]).

Según diversos autores que se han ocupado del análisis estratigráfico de la Cuenca Neuquina [1,2, 7-11], el lapso Jurásico Medio - Cretácico Temprano se caracterizó por una etapa de subsidencia térmica generalizada a la que se ha denominado como fase de “sag” o postrift y que llevó a la integración de depocentros, los que en una fase previa aparecían desconectados entre sí (Fig. 2). Esta etapa evolutiva se relaciona con la existencia de un margen continental convergente, en el que se producía la subducción con fuerte empinamiento de la placa proto-pacífica y el desarrollo de un arco magmático activo a lo largo del flanco occidental de la Cuenca Neuquina. Con referencia a la evolución tectosedimentaria, se ha determinado que la fase de “sag” fue periódicamente alterada por reactivaciones tectónicas, manifestadas como eventos de inversión estructural [9, 12, 13, 14, 15] y asociadas con cambios en el régimen de subducción y reorganización de intraplaca. Estos episodios favorecieron la generación de discordancias regionales y la acumulación de diversas cuñas sedimentarias de mar bajo [16], que se caracterizaron por una amplia distribución de depósitos continentales (Fig. 2).

Relaciones entre el registro sedimentario, la acomodación y las áreas de aporte

Los materiales silicoclásticos que componen las sucesiones sedimentarias son de naturaleza terrígena, ya que se deben al aporte de detritos desde las áreas positivas que marginan a las cuencas sedimentarias. En el caso de la Cuenca Neuquina es claro que estos componentes han sido el producto de contribuciones desde el Sistema de la Sierra Pintada por el flanco oriental, el Macizo Norpatagónico por los flancos sudoriental y sur, y el arco magmático por el margen occidental [17]. A estas áreas deben sumarse las contribuciones desde bloques intracuencales (como por ejemplo la Dorsal de Huincul) exhumados como resultado de los ya indicados procesos de inversión tectónica de antiguas fallas extensionales [18, 19]. No obstante, es muy poco lo que se conoce sobre la influencia que han ejercido estos aportes en la constitución de los sedimentos acumulados durante el Jurásico y Cretácico en la Cuenca Neuquina. Al respecto, se ha destacado que el arribo de materiales detríticos siguió una tendencia general axial, desde el S y SE hacia el NO, en tanto que las contribuciones desde el oeste fueron secundarias, ya que generaron espesas sucesiones sedimentarias de depósitos predominantemente proximales, pero muy limitadas en sentido regional [1].

Con la finalidad de hacer en el presente trabajo un análisis de las características del registro sedimentario, la acomodación y la influencia de las áreas de aporte en la Cuenca Neuquina, se ha seleccionado el lapso comprendido entre el Kimmeridgiano (Jurásico Tardío) y el Valanginiano Temprano (Cretácico Temprano).

Durante el Kimmeridgiano, como resultado de un proceso de regresión forzada se desarrolló en la Cuenca Neuquina una cuña de mar bajo en la que predominaron los procesos fluviales y eólicos [18, 20]. En cambio, en el Tithoniano Temprano (Jurásico Tardío), a causa de la combinación entre un ascenso eustático generalizado y de subsidencia en el trasarco se produjo una rápida transgresión marina con la consecuente expansión de esos ambientes en todo el ámbito de la Cuenca Neuquina, la que quedó conectada con el océano Proto-Pacífico a través de una serie de pasos o conductos que cortaron transversalmente al arco magmático [21, 22]. Durante el lapso Tithoniano a Valanginiano Temprano se formó un espeso y ampliamente distribuido conjunto de sedimentos marinos que se relaciona con un continuo proceso de subsidencia térmica, combinado con fenómenos de extensión regional de trasarco.

La cuña de mar bajo kimmeridgiana

Debido a la brusca caída relativa en el nivel del mar, acaecida en el Kimmeridgiano se acumularon sedimentos que son característicos de ambientes continentales y que se formaron bajo condiciones climáticas áridas y semiáridas (Formación Tordillo y equivalentes; Fig. 2). Dos importantes estructuras intracuencales, la Dorsal de Huincul [23] y el Dorso de los Chihuidos [24] (Fig. 3), generaron relieves positivos y produjeron una compartimentalización de la cuenca en tres depocentros: Noroeste, Sudoeste y Este [18, 16, 20].

Las sucesiones sedimentarias en los depocentros Sudoeste y Este (Fig. 3) están caracterizadas por depósitos de sistemas fluviales efímeros que pasan verticalmente a sistemas de acumulación eólicos que muestran la implantación de un amplio desierto de arena (erg) en ambas subcuencas [20]. En el Depocentro Este los materiales fluviales procedieron tanto desde el margen nororiental de la cuenca como desde la Dorsal de Huincul por el sur (Fig. 3). Por su parte, la principal área de contribución detrítica en el Depocentro Sudoeste fue el Macizo Norpatagónico (Fig. 3). En ambos depocentros, los aportes de materiales eólicos se dieron desde el sudoeste [20].

En el Depocentro Noroeste las facies sedimentarias muestran un cambio sistemático en su arquitectura, y desde las zonas proximales a las distales se pasa desde ambientes de abanico aluvial a fluvial efímero y de barreal [18, 20]. Las paleocorrientes indican aportes desde la Dorsal del Huincul por el sur y desde el arco magmático por el oeste (Fig. 3).

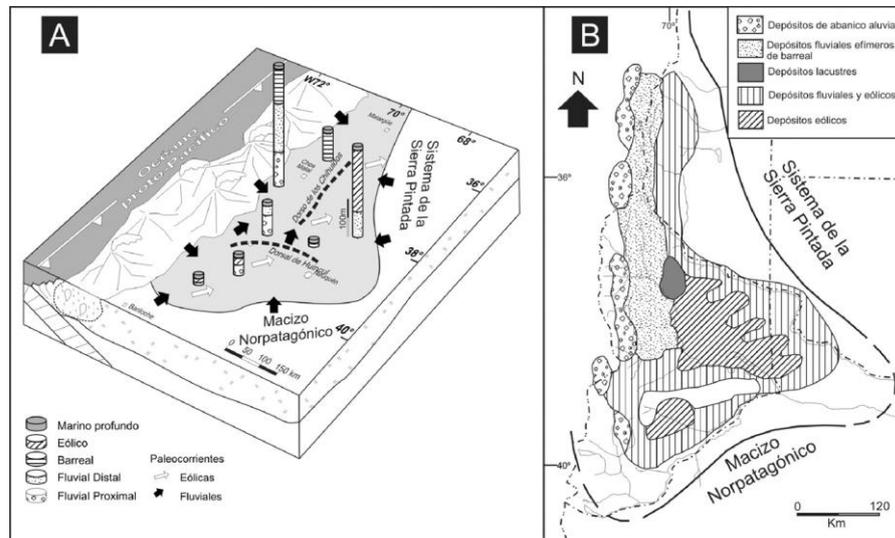


Fig. 3. Panorama de la cuenca durante el Kimmeridgiano. A. Evolución esquemática de los sistemas de deposición [20]. B. Mapa con la distribución regional de los principales sistemas de acumulación [16].

Paralelamente a los cambios en las facies sedimentarias y en los sistemas de acumulación, también se aprecian para los depósitos de la cuña de mar bajo kimmeridgiana significativas variaciones de espesor (Figs. 3 y 4). En el Depocentro Sudoeste el registro alcanza tan sólo 40 m [25, 16]; en el Depocentro Este el máximo espesor es de 320 m, pero decrece significativamente hacia los márgenes el NE, E y S de la cuenca [26, 27, 28]. Por su parte en el Depocentro Noroeste se manifiestan importantes cambios en la potencia de los depósitos, la que con valores muy reducidos en los sectores sur y este se incrementa notablemente hacia el sector noroeste de la depresión, con valores que superan los 450 m [16, 18].

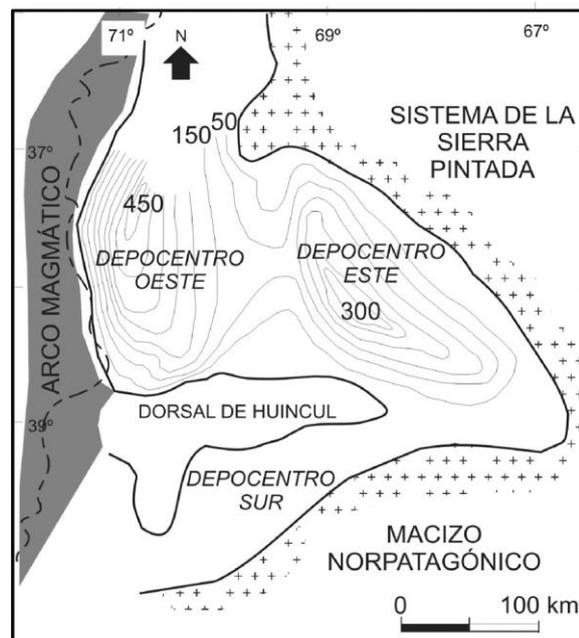


Fig. 4. Los depocentros kimmeridgianos con la distribución de los espesores sedimentarios (modificado de [18]).- 41 -
L. A. Spalletti. Premio Consagración ANCFN-2013

El incremento de espesor hacia el flanco del Depocentro Noroeste que se encuentra próximo al arco magmático está acompañado por un muy particular ordenamiento de facies (Figs. 3 y 5) y por rasgos composicionales característicos. En tal sentido, la porción basal de estas sucesiones está constituida por depósitos aluviales proximales cuyos detritos han sido aportados por la denudación del arco magmático (18-20) y que pasan en sentido vertical a un potente conjunto de sedimentitas fluviales distales y de ambientes de barreal. El importante desarrollo de estas últimas facies, asociado con un diseño de superposición netamente retrogradacional, refleja un progresivo incremento de la acomodación (Fig. 5) o espacio disponible para la acumulación sedimentaria en este sector de la cuenca.

La transgresión tithoniana y la sedimentación marina tithono-neocomiana

En la mayor parte de la Cuenca Neuquina, los depósitos de la transición Jurásico-Cretácico (Formación Vaca Muerta) se caracterizan por sedimentitas de grano fino (pelitas y margas) con alto contenido en materia orgánica por lo que son mayormente oscuras y bituminosas. La base de esta unidad es una superficie isócrona que marca el inicio de la transgresión tithoniana, en tanto que su límite superior es progradacional y diacrónico, con registros más jóvenes a medida que se pasa desde el sector sur al central de la cuenca, donde alcanzan el Valanginiano Temprano [29-31] (Fig. 2).

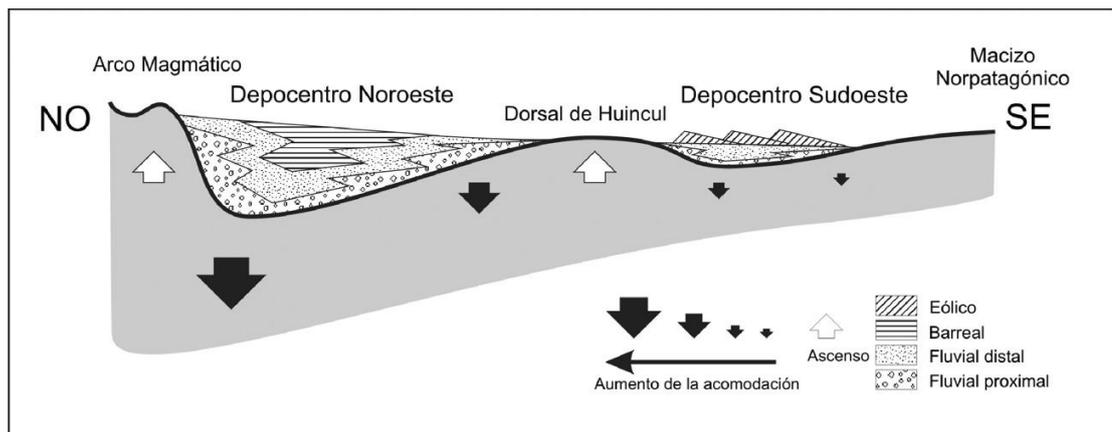


Fig. 5. Sección NO-SE de la cuña de mar bajo kimmeridgiana. Variaciones regionales y verticales en los sistemas sedimentarios de los depocentros Noroeste y Sudoeste y cambios laterales en la acomodación (tomada de [20]).

La expansión marina del Jurásico Tardío se ha vinculado con un período de relajamiento y subsidencia regional que sucedió a una fase de intensa inversión tectónica [9]. Así, los depósitos tithonianos basales se deben a una transgresión que acaeció rápidamente como resultado de un ascenso eustático asociado con reducidos aportes terrígenos, cuya combinación pudo haber motivado una sedimentación condensada de características anaeróbicas a disaeróbicas [1,7]. En tal contexto, se ha señalado [32, 33] que la geometría en golfo de la cuenca y el parcial aislamiento fisiográfico respecto al Océano Proto-Pacífico por crecimiento del arco magmático andino favorecieron el estancamiento de las aguas, el desarrollo de una marcada termo-picnoclina y la anoxia en las áreas depocentrales de la cuenca. La existencia de un mar de aguas cálidas favoreció asimismo el desarrollo de un sistema con alta productividad de nutrientes que contribuyó a la instalación de un ambiente anóxico en el sustrato de amplias regiones de la Cuenca Neuquina [34, 35].

Sobre la base de la geometría general del sustrato deposicional, se ha propuesto un modelo de rampa marina para el Tithoniano - Berriasiano de la Cuenca Neuquina [7, 31] que

ha sido ampliamente aceptado. El mismo está caracterizado por una pendiente de bajo ángulo y uniforme hacia el depocentro, sin quiebre de la plataforma y desprovisto de estructuras arrecifales de dimensiones regionales (Fig. 6). El patrón de distribución de facies carbonáticas y silicoclásticas está caracterizado por una transición gradual desde áreas marinas someras a profundas, en las que definen ambientes de rampa interna, media, externa y cuenca profunda [32, 34]. En tal contexto, buena parte de los depósitos corresponden a los sectores más distales y profundos de la rampa marina y son principalmente el producto de la decantación suspensiva de finos materiales terrígenos y no terrígenos.

La geometría en rampa se define en amplias regiones de la Cuenca Neuquina, y para el Jurásico Tardío y Cretácico Temprano se manifiesta con una gradual profundización desde los sectores cratónicos marginales ubicados en los flancos oriental, sudoriental y sur de la Cuenca Neuquina [6, 31, 36-38]. De este modo, la parte más profunda se ubica hacia el sector occidental, en una faja de rumbo NO-SE levemente oblicua con respecto al arco magmático andino [21, 38]. Procesos de significativa progradación, con la generación de cliniformas deposicionales [31, 39], se observan en las sucesiones sedimentarias a medida que se pasa de los sectores más someros a los más profundos de la cuenca (Fig. 6).

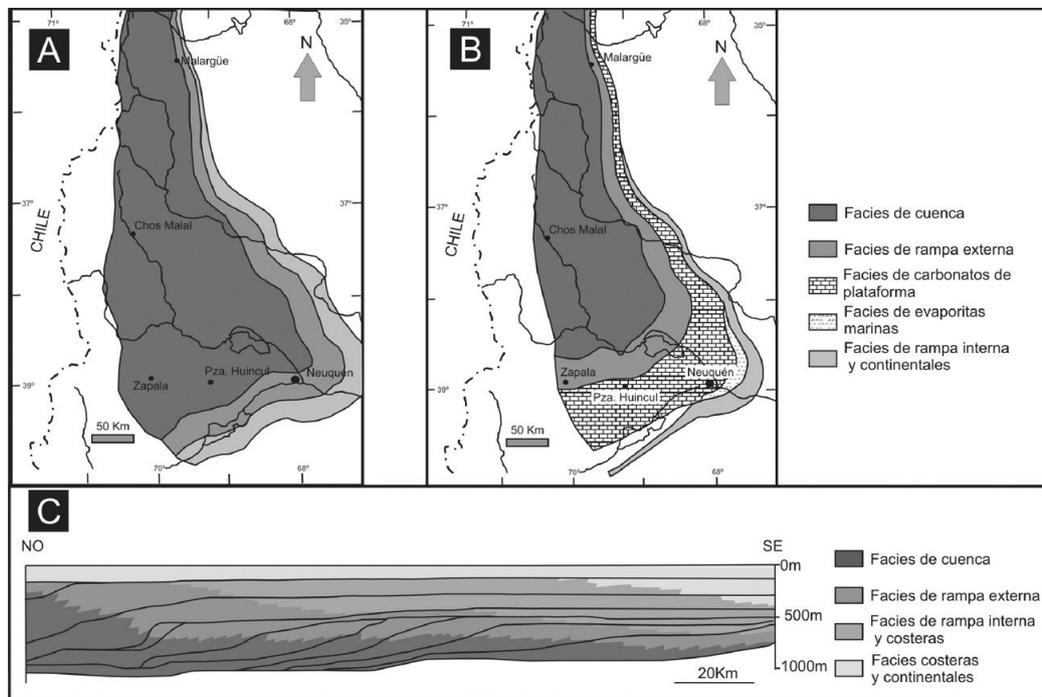


Figura 6. A y B. Mapas paleogeográficos de la Cuenca Neuquina para el Tithoniano y Berriasiano (modificados de [1, 7]). C. Sección regional del registro sedimentario Tithoniano – Valanginiano (modificado de [31] por [61]).

Asimismo, en comparación con lo que se registra en los sectores marginales cratónicos, los depósitos marinos de la región depocentral no sólo son los más distales, sino que alcanzan también los máximos espesores, que superan los 500 m [cf. 39, 40], poniendo de manifiesto la generación de una mucho mayor acomodación y fuerte asimetría en la subsidencia cuencal entre los márgenes cratónicos y el depocentro (Fig. 7).

Por su parte, la reconstrucción de los sistemas depositacionales hacia el sector occidental de la Cuenca Neuquina, es decir hacia el margen limitado por el arco magmático, es más problemática. Ello se debe a la supresión de buena parte del registro geológico durante la ulterior elevación de la cadena andina. No obstante, en una faja de afloramientos adyacente al arco magmático se han encontrado evidencias que permiten inferir algunos de los procesos de

acumulación ocurridos en el margen occidental del mar tithono-neocomiano [19, 42]. Se trata de depósitos generados por flujos gravitacionales de sedimentos (corrientes de turbidez de alta y baja densidad) y desmoronamientos de grandes dimensiones que removilizaron depósitos turbidíticos previos (Fig. 8). Estos procesos permiten interpretar la existencia de una zona de gradiente elevado en el flanco occidental activo de la cuenca y un perfil del fondo marino con quiebre de pendiente y desarrollo de un talud (Fig. 8). Los materiales detríticos provinieron de la denudación de las áreas marginales constituidas por las rocas del arco magmático, y si bien llevaron a la acumulación de un importante espesor de sedimentos, tuvieron una extensión bastante limitada hacia el interior de la cuenca (cf. 1, 19).

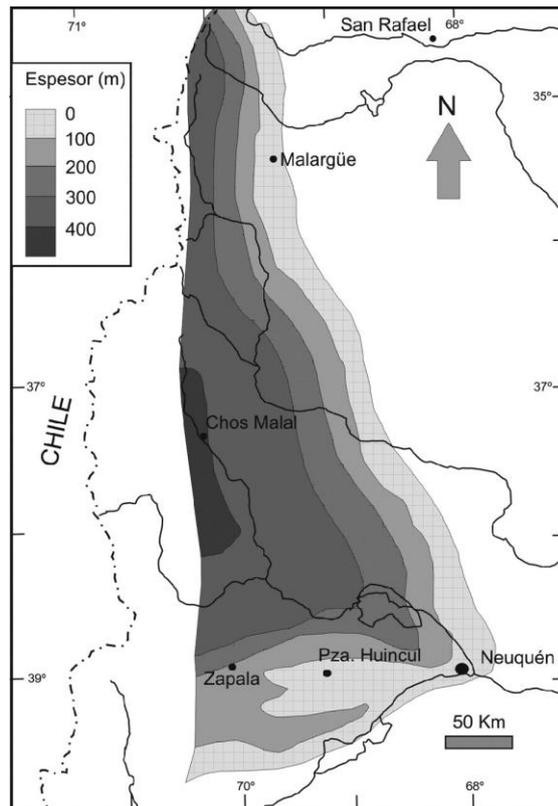


Fig. 7. Mapa de espesores de la Formación Vaca Muerta (Tithoniano – Valanginiano Temprano), modificado de [41]. - 43 - L. A. Spalletti. Premio Consagración ANCFN-2013

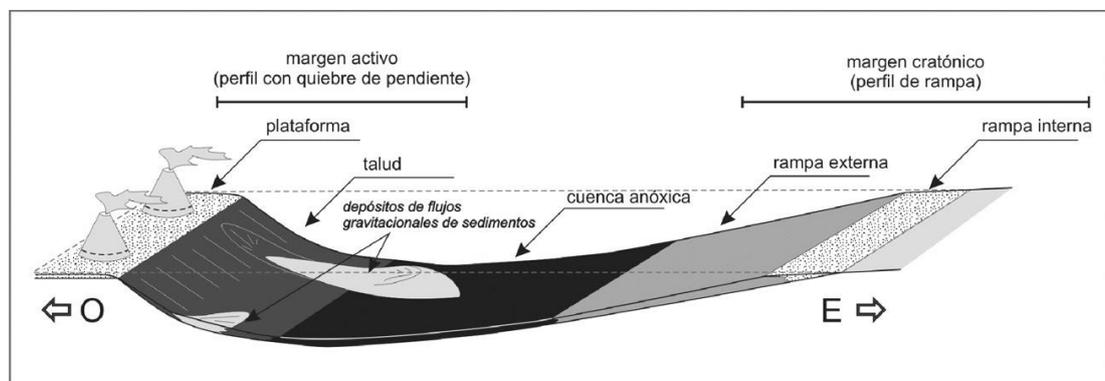


Fig. 8. Modelo del trasarco neuquino que muestra las diferencias en la fisiografía y los procesos de sedimentación entre los márgenes con talud, vinculado al arco magmático, y de rampa, asociado al área cratónica de la cuenca, según [19].

Discusión

Buena parte de los procesos de deformación que se producen en los márgenes de convergencia de placas tectónicas se explican por la relación entre la litósfera y la astenósfera. La primera constituye la capa externa de la Tierra que presenta rigidez ante los esfuerzos aplicados durante importantes intervalos de tiempo, mientras que la astenósfera tiene un comportamiento fluido. En estas regiones, los fenómenos de deformación pueden provocar una flexura de la litósfera rígida, la que transmite lateralmente los esfuerzos aplicados. Este mecanismo es conocido como isostacia regional o simplemente flexión [43-45]. Una de las causales de la flexión litosférica es la sobrecarga producida por el emplazamiento de importantes edificios tectónicos, como las cadenas de montañas y los arcos de islas [46].

Asimismo, como resultado de la compensación flexural-isostática de la litósfera, en las regiones adyacentes a dichos rasgos tectónicos se produce subsidencia y por ende creación de espacio para la acumulación sedimentaria [47, 48]. Un hecho particular en estos casos es que la deflexión es máxima junto a la carga y disminuye progresivamente al alejarse de ésta. Además, se observa que a cierta distancia de la carga, la deflexión llega a anularse y cambia de signo, [49, 50] formando una elevación que recibe el nombre de *forebulge* (traducido aquí como combamiento frontal). En consecuencia, al patrón de subsidencia de las cuencas sedimentarias que se forman en estas circunstancias es fuertemente asimétrico, con la máxima generación de espacio en regiones adyacentes al edificio que muestra la flexión litosférica [51, 52].

Los ejemplos más estudiados de depresiones sedimentarias generadas en estas circunstancias son los de las cuencas de antepaís [53] que se forman en las regiones de contacto entre placas convergentes y se desarrollan entre un cratón (flanco estable) y una cordillera plegada (flanco activo). En este caso la subsidencia se debe a la flexión elástica producida por la carga de estructuras cabalgantes o sobrecorrimientos. Así, cuando el transporte del esfuerzo es en la dirección de la cuenca, el depocentro se ubica inmediatamente al frente de la faja corrida [54].

Si bien en la Cuenca Neuquina se ha reconocido una fase de antepaís, gobernada por un régimen tectónico compresional debido al ascenso de la faja de sobrecorrimiento andina y acaecida entre el Cretácico Tardío y el Cenozoico [2, 7, 9, 55], no existen elementos de juicio para sostener que estas condiciones tectónicas se hayan registrado en tiempos anteriores al Cretácico Tardío.

La fuerte asimetría en la distribución de los espesores sedimentarios tanto de los depósitos de la cuña de mar bajo kimmeridgiana como de la sedimentación marina tithono-neocomiana, en ambos casos con máximos registros en la región adyacente al arco magmático, induce a pensar que la generación de la acomodación sedimentaria pudo tener relación con el crecimiento de esta barrera geológica y topográfica de origen plutónico-volcánico. Aún cuando el rol del volcanismo en la formación de depresiones sedimentarias ha sido generalmente ignorado, debe señalarse que varios autores [cf. 56-59] han sugerido que la deformación litosférica causada por sobrecarga volcánica puede llevar a la formación de cuencas flexurales caracterizadas por importante subsidencia y por la acumulación desde centenares a miles de metros de depósitos sedimentarios.

En tal contexto, nuestros resultados permiten confirmar el modelo de Waltham y colaboradores [60] en el que se muestra que la carga producida por un arco magmático puede no sólo influir sino también constituirse en el factor más determinante de la subsidencia. Debe señalarse además que el efecto de carga es efectivo en regiones en las que existe un fuerte contraste de densidad entre la corteza inferior y los productos volcánicos; esta situación se da

particularmente en arcos magmáticos desarrollados sobre una corteza continental [60], tal como ocurre en el caso de la Cuenca Neuquina (Fig. 9A).

Vale consignar que los efectos de la carga volcánica sobre la creación de espacio para la acumulación sedimentaria son sólo importantes en las cuencas o en los sectores de las cuencas que se encuentran próximos al arco magmático. Sus efectos se atenúan rápidamente y desaparecen en las áreas que se hallan a distancias del orden de los 100 Km del arco [60].

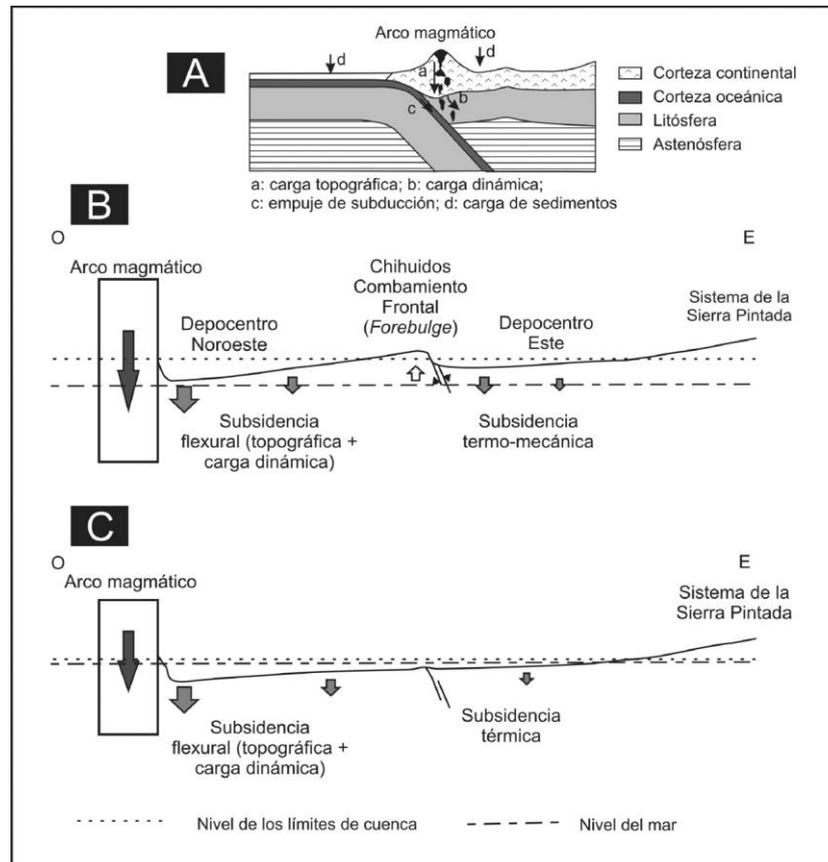


Fig. 9. Diagramas esquemáticos que muestran la relación entre la generación de espacio para la sedimentación y la carga producida por el desarrollo del arco magmático. A. Marco general de margen continental activo. B. Situación correspondiente a la cuña de mar bajo del Kimmeridgiano. C. Situación correspondiente a la sedimentación marina tithono-neocomiana.- 45 - L. A. Spalletti. Premio Consagración ANCEFN-2013

En la Cuenca Neuquina los patrones resultantes de subsidencia para el lapso Jurásico Tardío y Cretácico Temprano han sido complejos y no pueden ser asociados tan sólo con un enfriamiento cortical generalizado (fase de *sag*) como se ha interpretado tradicionalmente. Así como se ha demostrado que a este proceso debe sumársele el efecto producido por la reactivación de fallas intracuencales, también es necesario considerar que la marcada asimetría de la subsidencia entre el sector adyacente al arco magmático y las amplias regiones de la rampa pudo estar fuertemente influenciada por el fenómeno de compensación flexural isostático producido por la carga del arco magmático.

Por otra parte, el relieve positivo debido al crecimiento del arco magmático constituyó una barrera natural para la expansión hacia el oeste de la cuenca, a la vez que permitió el drenaje de los flujos gravitacionales (aluviales, fluviales y en masa) hacia el este. Es claro que las pendientes eran mucho más empinadas en el flanco occidental y en cortas

distancias se pasaba desde áreas fuertemente positivas (el arco) al eje del depocentro; en tanto, los gradientes eran considerablemente menores en los sectores relacionados con los márgenes del interior continental, siendo muy amplias las distancias entre el borde de la cuenca y el eje del depocentro. Asimismo, la fuerte asimetría en la acomodación sedimentaria, con la localización del eje del depocentro en las cercanías del arco magmático permite explicar la relativamente escasa expansión de los depósitos de flujos gravitacionales hacia en este y el menor impacto que tuvieron los aportes detríticos desde el arco magmático sobre amplias áreas de acumulación de la Cuenca Neuquina.

Durante el Kimmeridgiano, debido a la importante carga ejercida por el arco magmático no sólo se produjo subsidencia por compensación flexural isostática, sino que se desarrolló el combamiento frontal (*forebulge*) de Chihuidos. Esta elevación, debida al efecto aditivo de flexión litosférica con inversión de antiguas fallas de rift, produjo la compartimentalización de la cuenca en los depocentros Noroeste y Este (Fig. 9B). Por su parte, los tiempos tithono-neocomianos se caracterizaron por el ascenso generalizado el nivel del mar; la carga del arco magmático parece haberse reducido, ya que aunque fue manifiesta la subsidencia flexural, se atenuó significativamente el combamiento frontal de Chihuidos, mientras que la subsidencia térmica se generalizó y dominó en amplias regiones de la Cuenca Neuquina (Fig. 9C).

Agradecimientos

El autor expresa su reconocimiento al CONICET, la SECyT y la Universidad Nacional de La Plata por la financiación brindada a largos años de investigaciones en la Cuenca Neuquina. Un especial agradecimiento a la Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales por el honor que significa haber recibido el Premio Consagración 2013 en Ciencias de la Tierra.

Referencias

- [1] L. Legarreta & M.A. Uliana, *Palaeogeogr. Palaeoclimat. Palaeoecol.* **120**, 303 (1996).
- [2] J. Franzese, J., L. Spalletti, I. Gómez Pérez & D. Macdonald, *J. South Amer. Earth Sci.* **16**, 81 (2003).
- [3] J.A. Howell, E. Schwarz, L.A. Spalletti & G.D. Veiga, en *The Neuquén Basin: a case study in sequence stratigraphy and basin dynamics*, G.D. Veiga, L.A. Spalletti, J.A. Howell & E. Schwarz (Editores), Geological Society of London, Special Publications **252**, 1 (2005).
- [4] P. Groeber, *Rev. Asoc. Geol. Argent.* **1**, 177 (1946).
- [5] P. Groeber, P.N. Stipanovic & A.G. Mingramm, *Geografía de la Argentina. Sociedad Argentina de Estudios Geográficos GAEA* **2**, 143 (1953).
- [6] L. Legarreta & C.A. Gulisano, en *Cuencas Sedimentarias Argentinas*, G. Chebli & L. Spalletti (Editores), Serie Correlación Geológica **6**, 221 (1989).
- [7] L. Legarreta & M.A. Uliana, en *Sea Level Changes at Active Plate Margins: Process and Product*, D.I.M. Macdonald (Editor.), International Association of Sedimentologists, Special Publication **12**, 429 (1991).
- [8] L. Legarreta, C.A. Gulisano & M.A. Uliana, en *Relatorio Geología y Recursos Naturales de Mendoza*, XII Congreso Geológico Argentino y II Congreso de Exploración de Hidrocarburos **1**, 87 (1993).

- [9] G.D. Vergani, A.J. Tankard, H.J. Belotti & H.J. Welsink, en *Petroleum Basins of South America*, A.J. Tankard, R. Suárez Soruco & H.J. Welsink (Editores), American Association of Petroleum Geologists Memoir **62**, 383 (1995).
- [10] E.O. Cristallini, G. Bottesi, A. Gavarrino, L. Rodriguez, R.N. Tomezzoli & R. Comeron, en *Evolution of the Andean Margin: a Tectonic and Magmatic View from the Andes to the Neuquén Basin (35°-39° S Lat.)*, S.M. Kay, & V.A. Ramos, (Editores), Geological Society of America Special Paper **407**, 147 (2006).
- [11] H.A. Leanza, *Rev. Museo Argent. de Cs. Nat. B. Rivadavia* **11**, 145 (2009).
- [12] A.J. Tankard, M.A. Uliana, H.J. Welsink, V.A. Ramos, M. Turic, A.B. França, E.J. Milani, B.B. Brito Neves, N. Eyles, J. Skarmeta, H. Santa Ana, F. Weins, M. Cirbián, O. López Paulsen, G.J.B. Germs, M.J. De Wit, T. Machacha & R. McG Miller, en *Petroleum Basins of South America*, A.J. Tankard, R. Suárez Soruco & H.J. Welsink (Editores), American Association of Petroleum Geologists Memoir **62**, 5 (1995).
- [13] R. Veiga, H. Verzi & H. Maretto, *Bol. Inform. Petrol.* **18**, 50 (2001).
- [14] F. Pángaro, R. Veiga & G. Vergani, G., *Actas 5° - 46 - Congreso Argentino de Exploración de Hidrocarburos*, 15 pp. Actas en CD. (2002).
- [15] A. Comínguez & J. Franzese, *Abstracts 6th International Symposium on Andean Geodynamics (ISAG)* (2005).
- [16] L.A. Spalletti, C. Arregui & G.D. Veiga, en *Relatorio XVIII Congreso Geológico Argentino: Geología y Recursos Naturales de la provincia del Neuquén*, H. Leanza, J. Vallés, C. Arregui & J.C. Danieli (Editores) **10**, 99 (2011).
- [17] R.L. Kugler, *Ph. D. Dissertation, Faculty of Graduate School of the University of Texas at Austin*, 524 pp. (1987)
- [18] L. Spalletti & F. Colombo Piñol, *Gondwana Res.* **8**, 363 (2005).
- [19] L. Spalletti, G. Veiga, E. Schwarz & J. Franzese, *Rev. Asoc. Geol. Argent.* **63**, 442 (2008).
- [20] L. Spalletti & G. Veiga, *Latin Amer. J. Journal Sedimentol. Basin Anal.* **14**, 85 (2007).
- [21] L. Spalletti, J. Franzese, S. Matheos & E. Schwarz, *J. Geol. Soc. London* **157**, 433 (2000).
- [22] D. Macdonald, I. Gómez Pérez, J. Franzese, L. Spalletti, L. Lawver, L. Gahagan, I. Dalziel, C. Thomas, N. Trewin, M. Hole & D. Paton, *Marine Petrol. Geol.* **20**, 287 (2003).
- [23] J.V. Ploszkiewicz, I.A. Orchueta, J.C. Vaillard & R.F. Viñes, *Actas IX Congreso Geológico Argentino II*, 163 (1984).
- [24] V. A. Ramos, en *Relatorio Geología y Recursos Naturales del Neuquén. VII Congreso Geológico Argentino* 99 (1978).
- [25] G.D. Veiga & L.A. Spalletti, *Gondwana Res.* **11**, 286 (2007).
- [26] C. Arregui, *Actas XII Congreso Geológico Argentino* **1**, 165 (1993).
- [27] L.B. Cazau & A.T. Melli, *Actas 5° Congreso Argentino de Exploración de Hidrocarburos*, 19 pp. Actas en CD. (2002).
- [28] H. Maretto, O. Carbone, C. Gazzera & M. Schiuma, en *Rocas Reservorio de las Cuencas Productivas Argentinas*, M. Schiuma, G. Hinterwimmer & G. Vergani (Editores), 5° Congreso de Exploración y Desarrollo de Hidrocarburos 335 (2002).
- [29] H.A. Leanza, *Rev. Asoc. Geol. Argent.* **28**, 97 (1973).
- [30] H. A. Leanza, en *Cuencas Sedimentarias del Jurásico y Cretácico de América del Sur*, W. Volkheimer & E. Mussachio (Editores) **2**, 559 (1981).
- [31] R.M. Mitchum, & M.A. Uliana, en *Seismic Stratigraphy: an Integrated Approach to Hydrocarbon Exploration*, B.R. Bero & D.G. Woolverton (Editores), American Association of Petroleum Geologists, Memoir **39**, 255 (1985).
- [32] L. Spalletti, G. Veiga, Z. Gasparini, E. Schwarz, M. Fernández & S. Matheos, *Boletim 5to. Simposio Cretácico do Brasil y Primer Simposio sobre Cretácico de América del Sur* 345 (1999).
- [33] Z. Gasparini, L. Spalletti, M. Fernández & M. de la Fuente, *Rev. Paléobiol.* **18**, 335 (1998).

- [34] L. Spalletti, Z. Gasparini, G. Veiga, E. Schwarz, M. Fernández & S. Matheos, *Rev. Geol. Chile* **26**, 109 (1999).
- [35] Z. Gasparini, L. Spalletti, S. Matheos & M. Fernández, *Actas XV Congreso Geológico Argentino I*, 473 (2002).
- [36] C.A. Gulisano, A.R. Gutiérrez Pleimling & R.E. Digregorio, *Actas IX Congreso Geológico Argentino I*, 236 (1984).
- [37] L. Spalletti, D. Poiré, E. Schwarz & G. Veiga, *J. South Amer. Earth Sci.* **14**, 609 (2001).
- [38] P. Doyle, D. Poiré, L. Spalletti, D. Pirrie, P. Brenchley & S. Matheos, *The Neuquén Basin: a Case Study in Sequence Stratigraphy and Basin Dynamics*, G.D. Veiga, L. Spalletti, J. Howell & E. Schwarz (Editores), Geological Society of London, Special Publication **252**, 185 (2005).
- [39] H.A. Leanza, F. Sattler, R.S. Martínez & O., Carbone, en *Relatorio XVIII Congreso Geológico Argentino: Geología y Recursos Naturales de la provincia del Neuquén*, H. Leanza, J. Vallés, C. Arregui & J.C., Danieli, (Editores) **12**, 113 (2011).
- [40] L. Legarreta, G.:A. Laffitte & S.A. Minniti, *Actas 4° Congreso de Exploración y Desarrollo de Hidrocarburos I*, 145 (1999).
- [41] L. Legarreta, H.J. Villar, G.A. Laffitte, C.A. Cruz & G. Vergani, en *Frontera Exploratoria de la Argentina*, G.A. Chebli, J.S. Cortiñas, L.A. Spalletti, L. Legarreta & E.L. Vallejo (Editores), Simposio del 6° Congreso de Exploración y Desarrollo de Hidrocarburos. IAPG, 233 (2005).
- [42] H.A. Leanza, C.A. Hugo, D. Repol & M. Salvarredy Aranguren, *Rev. Asoc. Geol. Argent.* **58**, 248 (2003).
- [43] D.L. Turcotte, D.C. McAdoo & J.G. Caldwell, *Tectonophysics* **47**, 193 (1978).
- [44] A.B. Watts, G.D. Karner & M.S. Steckler, *Philosophical Transactions Royal Society A* **305**, 249 (1982).
- [45] D. García Castellanos, *Tesis Instituto de Ciencias de la Tierra Jaume Almera*, CSIC, Barcelona, 170 pp. (1998).
- [46] M.C. Montaña Spagnolo, *Tesis de Grado, Universidad Simón Bolívar*, Sartenejas, Venezuela, 108 pp. (2008).
- [47] D.L. Turcotte & G. Schubert, *Geodynamics (2nd edition)*, Cambridge, Cambridge University Press, 456 pp. (2002).
- [48] A. Arche & J. López-Gómez, en *Sedimentología. del Proceso Físico a la Cuenca Sedimentaria*, A. Arche (Editor) Textos Universitarios, Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Madrid, 1183 (2010).
- [49] A.J. Tankard, en *Foreland Basins*, P.A. Allen & P. Homewood (Editores) International Association of Sedimentologists, Special Publication **8**, 369 (1986).
- [50] T.E. Jordan, en *Tectonics of Sedimentary Basins*, C.J. Busby & R.V. Ingersoll (Editores), Blackwell Science 331 (1995).
- [51] H.W. Posamentier & G.P. Allen, *Geology* **21**, 455 (1993).
- [52] N. Pang, N. & D. Nummedal, *Geology* **23**, 173 (1995).
- [53] W.R. Dickinson, en *Tectonics and Sedimentation*, W.R. Dickinson (Editor), Special Publication Society of Economic Paleontologists and Mineralogists **22**, 1 (1974).- 47 - L. A. Spalletti. *Premio Consagración ANCFN-2013*
- [54] P.A. Allen, P. Homewood & G.D. Williams, en *Foreland Basins*, P.A. Allen & P. Homewood (Editores) International Association of Sedimentologists, Special Publication **8**, 3 (1986).
- [55] V. A. Ramos, en *Geología Argentina*, R. Caminos (Editor), *Anales Inst. Geol. Recur. Miner.* **29**, 715 (1999).
- [56] A.B. Watts & J.R. Cochran, *Geophys. J. Royal Astronom. Soc.* **38**, 119 (1974).
- [57] A.B. Watts, C. Peirce, J. Collier, R. Dalwood, J.P. Canales, & T.J. Henstock, *Earth Planetary Sci. Lett.* **146**, 431 (1997).
- [58] H. Bahlburg & K.P. Furlong, *Tectonophysics* **259**, 245 (1996).
- [59] G.A. Smith, J.D. Moore & W.C. McIntosh, *J. Sediment. Res.* **72**, 836 (2002).

- [60] D. Waltham, R. Hall H.R. Smyth & C.J. Ebinger, *Geological Society of America, Special Paper* **436**, 11 (2008).
- [61] N. Rodrigues, P.R. Cobbold, H. Loseth & G. Ruffet, *J. Geol. Soc. London* **166**, 695 (2009).

Manuscrito recibido el 20 de marzo de 2014.
Aceptado el 25 de abril de 2014.

**SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE BIOMOLÉCULAS.
UN PUNTO DE ENCUENTRO ENTRE LA FÍSICO-QUÍMICA Y
LA BIOLOGÍA COMPUTACIONAL**

Marcelo A. Martí

Departamento de Química Biológica e INQUIMAE-CONICET, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales,
Universidad de Buenos Aires. Pabellón 2 Ciudad Universitaria,
Ciudad Autónoma de Buenos Aires C1428EHA.
E-mail: marti.marcelo@gmail.com

Resumen

La simulación computacional de biomoléculas consiste en la implementación de las bases físico-químicas del comportamiento de sistemas moleculares - como ser las proteínas - en un programa de computadora, para luego simular su comportamiento. En este trabajo comentaremos como a partir de la utilización de esta metodología se logra comprender el funcionamiento de la Nitroforina, una hemoproteína de la vinchuca que transporta óxido nítrico de manera pH dependiente. Los resultados descriptos en el presente trabajo permiten comprender como el óxido nítrico es atrapado por la proteína que se encuentra cerrada como una caja a bajo pH y se abre liberando el gas a un pH mayor. El responsable del cambio conformacional es el Ácido Aspártico 30 que cierra-abre la proteína al cambiar su estado de protonación. En su conjunto, el presente relato ejemplifica el uso de estas metodologías para comprender las bases moleculares del funcionamiento proteico y nos permite reflexionar sobre el potencial futuro de las computadoras cuando sean más veloces.

Palabras Clave: simulación computacional, QM/MM, proteínas, óxido nítrico, cambio conformacional

Abstract

Computer simulation of biomolecules. The meeting point between physical chemistry and computational biology. Computer simulation of biomolecules is based on the implementation of physical chemistry rules describing the behavior of molecular systems, like proteins, in a computer program. In the present work, we shall show how we were able to understand Nitrophorin, a pH dependent nitric oxide transport heme protein from the kissing bug, function using these methodologies. Our results allowed us to understand how nitric oxide is trapped in a closed protein at low pH, which opens and releases the gas upon pH increase. The residue responsible for the conformational changes is Aspartic acid Number 30 which open and closes the protein upon a change in its protonation state. Altogether, the present work is a comprehensive example of the use of these methodologies to understand the molecular basis of protein function.

Key words: computer simulation, QM/MM, proteins, nitric oxide, conformational change.

Introducción

De la interdisciplina a la simulación computacional de biomoléculas. Actualmente en el ámbito científico, es un lugar común de connotación positiva hablar de la interdisciplina y su importancia para resolver los enigmas de la naturaleza y producir avances científico-tecnológicos relevantes. Sin embargo, como pone en evidencia el dicho popular “del dicho al hecho hay mucho trecho”, y para lograr un verdadero y exitoso trabajo científico interdisciplinario es menester adoptar una estrategia que producirá sus resultados a mediano y/o largo plazo y que aparentara estar siempre “fuera de lugar” en los ámbitos académico-científico tradicionales. Realizar trabajo interdisciplinario requiere por un lado tener la humildad de reconocer en el otro aquellos conocimientos que uno no posee y por otro, estar dispuesto ambos a aprender un nuevo lenguaje que permita una comunicación eficiente en ambos sentidos. La simulación computacional de Biomoléculas, es necesariamente una temática científica interdisciplinaria, que integra conceptos de Física, Química, Computación y Biología. En el presente artículo mi intención es contarles, como, junto con un grupo de trabajo interdisciplinario de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad de Buenos Aires (FCEN-UBA), llevamos adelante un proyecto científico de estas características cuyo objetivo es comprender los mecanismos moleculares del funcionamiento proteico. [1-3]

Cuando comencé mis primeras actividades científicas en el grupo del Dr Estrin, allá por el año 2001, siendo estudiante de la carrera de Ciencias Biológicas, nunca imaginé todo lo que iba a tener aún que aprender de Química, Física y Computación para poder responder al problema científico que siempre tuve cerca del corazón, que es comprender el funcionamiento de las proteínas. En estas primeras etapas y ya entrando en el Doctorado, mi atención se centró en comprender la relación entre la estructura y función proteica utilizando métodos de simulación cuánticos (QM del inglés Quantum Mechanics). Estos métodos, también denominados *ab-initio*, surgieron de la Físico-Química teórica a mediados del siglo XX, y consisten en programas de computadora que buscan resolver la ecuación de Schrödinger para un sistema molecular, obteniendo como resultado la estructura electrónica del mismo, y sus propiedades asociadas (geometría molecular, energía, densidad electrónica etc.). Este tipo de metodologías, son centrales para poder describir procesos reactivos (ruptura y formación de enlaces covalentes) y propiedades asociadas a la química de coordinación de metales de transición (estados de oxidación y espín), sin embargo requieren un alto costo computacional y están por lo tanto limitados a simulaciones de sistemas de no mucho más de 100 átomos. Por otro lado, y teniendo su origen en la Mecánica Estadística y Newtoniana, la descripción de la dinámica de sistemas de miles átomos, como una proteína en solución acuosa, se puede realizar utilizando los denominados Métodos Clásicos (MM, del inglés Molecular Mechanics). En estos métodos la energía y fuerza del sistema son descritas mediante una función, relativamente simple, de las coordenadas atómicas y el movimiento del mismo es realizado utilizando las ecuaciones de Newton. En esta descripción las proteínas son descritas como un conjunto de “bolas (con carga) y resortes” y si bien es posible simular el comportamiento dinámico de una proteína entera en agua por cientos de nanosegundos, los mismos no permiten describir procesos reactivos. En este contexto el primer objetivo de mi Tesis Doctoral fue desarrollar un método que permitiera incorporar los efectos del entorno proteico al cálculo cuántico del sitio activo, para lo cual combinamos método QM con uno MM, creando un programa de computadora capaz de realizar cálculos híbridos o QM/MM (Figura 1). [1]

Las hemoproteínas como objeto de estudio. Desde el punto de vista de la temática proteica, mi objetivo se focalizó en comprender a las hemoproteínas, que son todas aquellas proteínas que poseen como grupo prostético una porfirina que contiene en el centro un átomo de hierro (Fig. 1). Las hemoproteínas, como la muy conocida hemoglobina, realizan muchas de sus funciones mediante la interacción del metal con moléculas gaseosas pequeñas como el O₂,

NO, CO entre otras, y una de las principales caracterizaciones consiste en determinar experimentalmente la afinidad y la cinética de interacción con los mismos. En otras palabras, determinar por un lado cual debe ser la presión del gas para que 50% de las proteínas se encuentren unidas al mismo (esto es formando un complejo Fe-X) y por otro cual es la velocidad de unión y liberación del mismo. Comprender y ser capaz de determinar estos procesos me llevó a complementar mi formación doctoral también en química experimental, realizando estudios de interacción entre O_2 , NO y HNO con hemoproteínas y metaloporfirinas en solución utilizando técnicas espectroscópicas bajo la dirección del Dr Doctorovich (FCEN-UBA). [1]

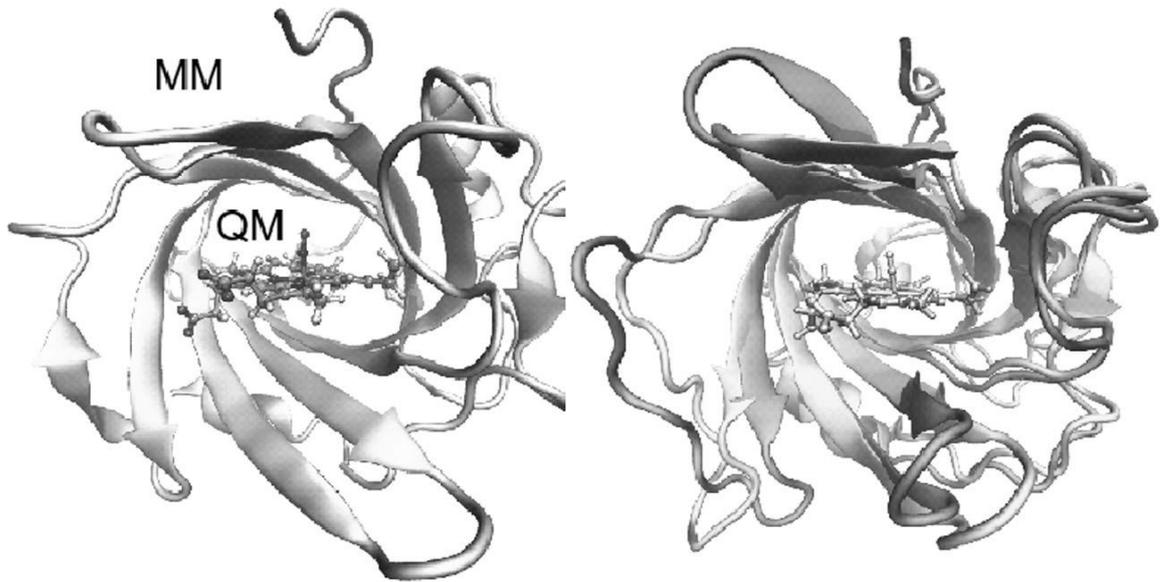


Fig. 1. A) La Nitroforina (NP), mostrando el grupo hemo unido al NO (Sistema QM) en CPK y el resto de la proteína en formato de cintas (sistema MM). B) Comparación de las estructuras de la NP a bajo-pH y alto-pH.

Una de las proteínas más interesantes que estudiamos es la denominada Nitroforina (NP), cuyo nombre combinación de “Nitro” por el óxido nítrico (NO) y “phorin” (transportador en griego), es una concisa descripción de su función, que es - 51 - M.A. Martí. Premio Pedro J. Aymonino en Química transportar al NO desde las glándulas salivales de la vinchuca (*Rhodnius prolixus*) a la cual pertenece, hasta su destino los vasos sanguíneos del hospedador. El NO es un potente vasodilatador y al ser liberado en los capilares, aumenta el flujo de sangre “asegurándole” al insecto un succulento almuerzo (Fig. 2). En la NP el NO es transportado unido al hierro y la pregunta que surge inevitablemente al observar su comportamiento es por qué el mismo es retenido cuando la proteína se encuentra en las glándulas salivales y liberado en el torrente sanguíneo. Las primeras pistas sobre el origen de este comportamiento diferencial surgieron de una combinación de estudios cinéticos y estructurales, realizados por nuestros colaboradores, que mostraron que la NP exhibe un cambio conformacional pH dependiente que es acompañado de un cambio en la velocidad de liberación del NO (Fig. 1B). En otras palabras a un pH de 5.5 como el que se encuentra en las glándulas salivales la proteína libera el NO muy lentamente (horas-días). Dentro del torrente sanguíneo la NP se encuentra expuesta a un pH de 7.4, lo que resulta en que esta cambie de forma y libere el NO en segundos. [2-3]

En este contexto nos propusimos responder utilizando técnicas de simulación computacional las siguientes preguntas:

¿Cuál es la razón estructural que permite la velocidad de liberación diferencial del NO?

- ¿Cuál es el mecanismo físico-químico subyacente que explica este comportamiento?
- ¿Cuáles son los determinantes estructurales y como ocurre el cambio conformacional (de forma) dependiente del pH?
- ¿Cuál es la descripción termodinámica del mismo?

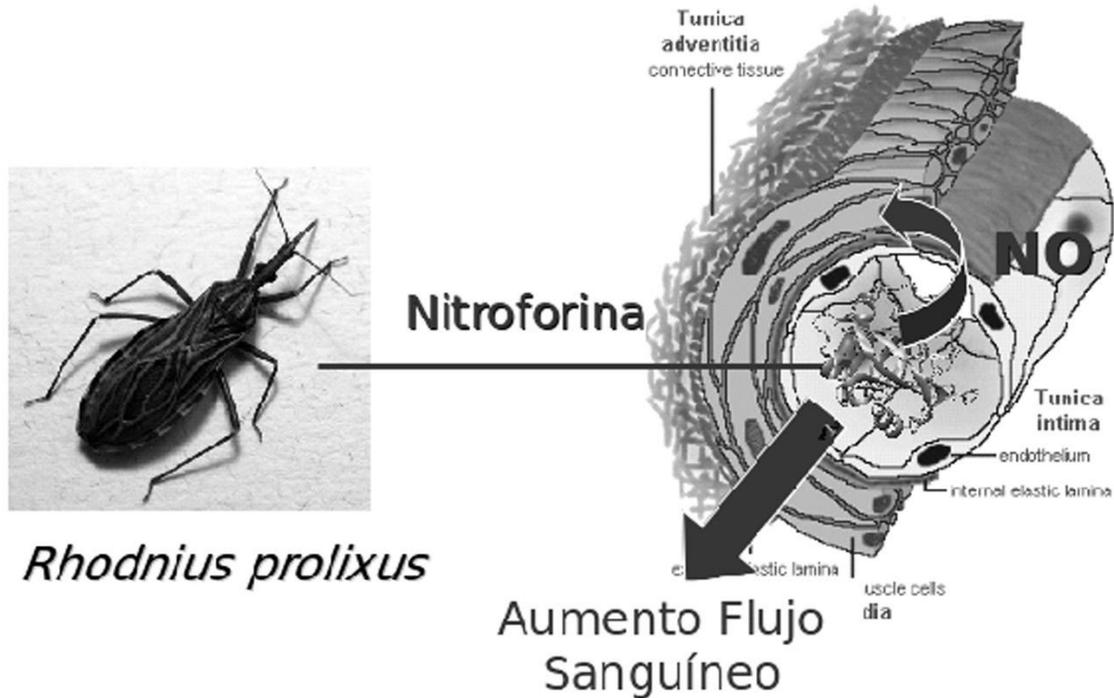


Fig. 2. Esquema del rol fisiológico de la Nitroforina.

Desarrollo de la Hipótesis de Trabajo y Resultados

La coordinación del NO no es la respuesta. Para intentar explicar cual es la razón de la liberación diferencial del NO en las dos formas de la NP (bajo-pH y alto-pH), nuestra primera hipótesis supuso que podría existir una energía de interacción mejor entre la NP y el NO coordinado al metal en la forma de bajo-pH respecto de la forma de alto-pH. La energía de interacción entre el NO y la NP posee dos componentes, por un lado la fuerza de la unión Fe-N y por otro la interacción del NO coordinado con el entorno proteico. La primera interacción es de clara naturaleza cuántica, mientras que la segunda puede ser descrita de manera adecuada con un método clásico que contemple contribuciones electrostáticas y de van der Waals. En este sentido representa un excelente ejemplo para utilizar el código QM/MM desarrollado, considerando al “hemo-NO” como el subsistema QM y al entorno proteico clásicamente. Por lo tanto y para poner a prueba nuestra hipótesis, determinamos la energía de interacción (y sus contribuciones) entre el NO y la NP en las estructuras correspondientes a ambas formas. Sorprendentemente los resultados mostraron que ambas contribuciones, la energía del enlace Fe-NO y la interacción del NO con el entorno proteico eran de una magnitud similar en ambas formas de la proteína, por lo que no existe una estabilización diferencial del NO coordinado en la estructura de bajo-pH que explique la liberación diferencial observada. Este resultado, resulta en un rechazo de nuestra primer hipótesis lo que nos llevó a plantear una hipótesis alternativa [2].

La liberación diferencial de NO es controlada por una “puerta” molecular. Desde el punto de vista microscópico, el proceso de liberación del NO involucra al menos dos pasos. El primero es la ruptura del enlace Fe-NO (estudiado en el punto anterior) y el segundo involucra la migración (o pasaje) del NO por la matriz proteica desde el sitio activo hasta el seno del solvente. Este proceso usualmente está facilitado por la presencia de cavidades y túneles hidrofóbicos que conectan el sitio activo sobre el metal con el solvente. Estas cavidades no representan un camino “libre” hacia el exterior y el NO debe transitar a través de éstos superando picos y valles en la superficie de energía libre asociada al proceso. En este proceso la velocidad con la que el NO es liberado es inversamente proporcional al tamaño de la barrera de energía libre que él mismo debe superar. Por lo tanto si la barrera fuera mayor en la estructura bajo-pH que en la alto-pH, esto podría explicar la velocidad diferencial de liberación. Bajo esta hipótesis decidimos determinar entonces el perfil de energía libre de salida del NO en ambas estructuras [2].

Determinar la energía libre asociada al proceso de migración requirió implementar en el marco de un programa clásico, un método que permitiera forzar al sistema a realizar el proceso deseado (la salida del NO), mientras se calcula la energía libre asociada al mismo. Para ello y en colaboración con el Dr. Roitberg (University of Florida, Gainesville, USA) implementamos un método basado en la Física Estadística, que guía al sistema mediante la aplicación de una fuerza externa, lo que permite calcular el trabajo realizado por el mismo para cada trayectoria. Luego combinando varias trayectorias en la denominada relación de Jarzynski se obtiene la energía libre. En nuestro caso realizamos 20 trayectorias “empujando” al NO desde el sitio activo de la NP hasta el solvente, tanto en la estructura de bajo-pH como la de alto-pH. Los perfiles de energía libre resultantes (Fig. 3A), junto con la visualización de la trayectoria, o camino recorrido por el NO a través de la proteína, hablan por si solos. En la estructura bajo-pH la barrera de energía libre para salir de la proteína es enorme (> 10 kcal/mol) mientras que en la estructura bajo-pH la barrera es muy pequeña (ca 2 kcal/mol) y la trayectoria (Fig. 3B) muestra claramente como el NO sale “por el camino más corto” hacia el solvente, pasando por entre los “loops” que diferencian ambas estructuras. En otras palabras mientras que en la estructura a alto pH la proteína prácticamente no ofrece resistencia a la salida del NO, en la estructura a bajo pH el mismo está atrapado en la proteína y no puede salir. Estos resultados confirman nuestra hipótesis de que la liberación diferencial del NO se debe a que el cambio en la estructura afecta el proceso de migración del mismo a través de la matriz proteica. La NP funciona entonces como una “caja” que se encuentra cerrada en la saliva del insecto y es abierta cuando la proteína se encuentra en el torrente sanguíneo [2].

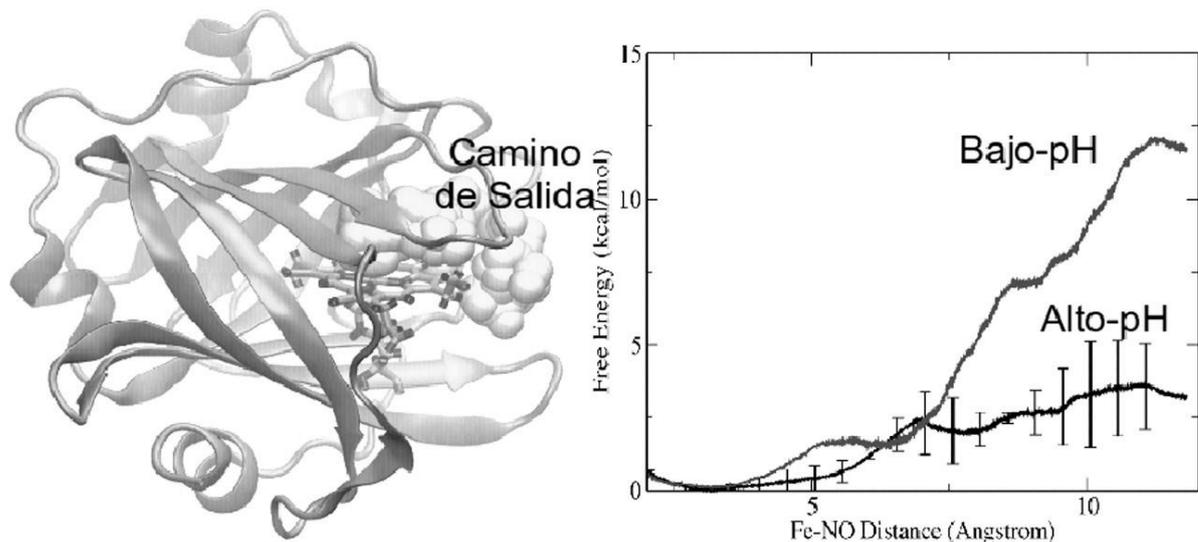


Fig. 3. A) Camino de salida del NO a través de la NP. B) Perfiles de energía libre para la salida del NO de la NP en la conformación bajo-pH y alto-pH.

El cambio de estructura pH dependiente. Finalmente, nos propusimos determinar cómo es que el cambio de pH del medio, resulta en un cambio de forma (conformacional) de la proteína. Para ello nos planteamos la siguiente hipótesis de trabajo: Sabiendo que el cambio de forma ocurre entre un pH de 5.5 a 7.5 debemos encontrar un aminoácido (o residuo) de la NP cuyo estado de protonación cambie en el mismo rango. O en otras palabras, que posea un pKa cercano a 6. Recordemos que el pKa se corresponde con el pH del medio al cual la fracción del residuo que se encuentra protonada es igual la del residuo sin protonar. Además, si el residuo es responsable del cambio conformacional debiera poseer interacciones diferenciales en una y otra estructura. Con esto en mente comparamos las interacciones de cada uno de los posibles residuos titulables de la NP en ambas estructuras. Si bien observamos varios candidatos, el más prometedor resulto el Ácido Aspártico Numero 30 (Asp30). Este residuo, se encuentra mirando hacia adentro de la proteína en la estructura a bajo-pH o “cerrada”, formando una interacción de tipo puente de hidrógeno con el carbonilo de la Leu129, mientras que está expuesto al solvente en la estructura de alto-pH o “abierta”. Nos propusimos entonces determinar el pKa del Asp30, para ello utilizamos una estrategia de simulación denominada “Dinámica Molecular a pH constante” que permite fijar el pH de la solución en un valor deseado, y deja que el sistema explore cuál es su estado de protonación más probable, variando la misma de acuerdo a cual posee menor energía libre. Realizamos entonces simulaciones fijando el pH del entorno respectivamente en valores que van desde 3 a 10 (espaciados cada 1), y determinamos en cada caso la población (que se corresponde con la fracción del tiempo) de los estados protonado y desprotonado. Los resultados que se muestran en la Fig. 4, evidencian que el pKa del Asp30 es 6.5 lo que coincide con lo esperado para ser el residuo responsable del cambio estructural. Más aún, el análisis detallado de las estructuras a lo largo de las trayectorias muestra que existe una relación casi biunívoca entre el estado de protonación del Asp30 y la estructura. O sea, siempre que la proteína se encuentra protonada la estructura se cierra y adopta la de bajo-pH, mientras que cuando el ácido está cargado (desprotonado) éste se expone al solvente y la NP se abre adoptando la estructura alto-pH [3].

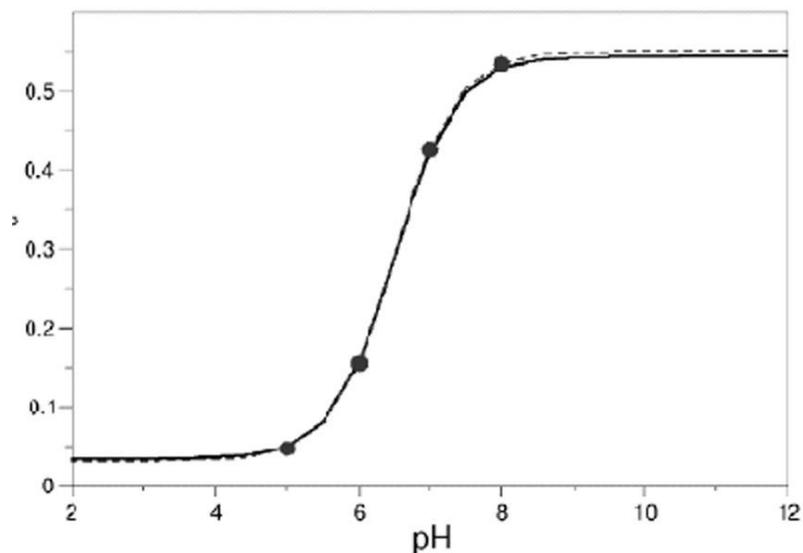


Fig. 4. Fracción de la proteína con el Asp30 desprotonado en función del pH del medio.

Como funciona entonces la NP? Los resultados conjuntos de los tres puntos anteriores permiten entonces explicar el funcionamiento de la NP a nivel molecular. Cuando la proteína es sintetizada en las glándulas salivales de la vinchuca donde el pH es cercano a 5,

la proteína se encuentra cargada con el NO, que también es sintetizado en este compartimiento, ya que el mismo es “retenido” dentro de la NP que está cerrada. Cuando la NP es liberada al torrente sanguíneo, enfrenta ahora un entorno con un pH superior, lo que dispara la desprotonación del Asp30 que al quedar cargado negativamente pierde su capacidad de interacción con la Leu130 y se expone al solvente, resultando en la apertura de la proteína. La proteína ahora abierta, presenta una vía libre para la salida del NO, que entonces es liberado, produciendo el efecto fisiológico deseado [2-3].

Conclusión

En este trabajo espero haberles podido transmitir mediante el ilustrativo ejemplo de la Nitroforina, como la Simulación Computacional de Biomoléculas, integrando conceptos de la Física y la Química en un programa de computadora, permite responder de manera precisa a preguntas relacionadas con el funcionamiento de las proteínas con detalle atómico-molecular, proceso que continúa siendo uno de los principales interrogantes de la Química Biológica moderna. Y si esta pequeña historia no ha sido suficiente para convencerlos del potencial impacto de estas metodologías, no puedo dejar de mencionar la enorme satisfacción personal que fue para nosotros enterarnos que el Premio Nobel de Química 2013, fue otorgado a Karplus, Levitt y Warshel “por el desarrollo de métodos de simulación computacional multiescala para el estudio de sistemas químicos complejos”, que entre otras cosas comprenden los descriptos en este trabajo. Por último y pensando en el futuro, no debe escaparse a nuestra atención, que el continuo incremento en la capacidad de procesamiento de las computadoras nos permitirá simular cada vez sistemas biológicos más grandes y más complejos prometiéndonos develar los secretos de la Química de la Vida.

Referencias

- [1] L. Capece, L. Boechi, L.L. Perissinotti LL, P. Arroyo-Mañez, D.E. Bikiel, G. Smulevich, M.A. Marti, & D.A. Estrin, *Biochim Biophys Acta* **1834**, 1722 (2013).
- [2] M.A. Martí, M.C. González Lebrero, A.E. Roitberg & D.A. Estrin, *J Am Chem Soc.* **130**, 1611 (2008).
- [3] N.V. Di Russo, D.A. Estrin, M.A. Martí & A.E. Roitberg, *PLoS Comput Biol.* **8**, e1002761 (2012).

Manuscrito recibido el 28 de marzo de 2014.

Aceptado el 25 de abril de 2014.

CERÁMICOS PIEZOELÉCTRICOS LIBRES DE PLOMO BASADOS EN LOS SISTEMAS $\text{Bi}_{0.5}(\text{Na}_{0.8}\text{K}_{0.2})_{0.5}\text{TiO}_3$ y $\text{K}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{NbO}_3$

M. S. Castro¹, J. Camargo¹, J. Taub¹, J.F. Fernandez², F. Rubio-Marcos²,
L. A. Ramajo¹,

¹Instituto de Investigaciones en Ciencia y Tecnología de Materiales (INTEMA -CONICET –
Universidad Nacional de Mar del Plata),
Av. Juan. B. Justo 4302 (B7608FDQ) Mar del Plata, Argentina.
lramajo@fi.mdp.edu.ar

²Departamento de Electrocerámica, Instituto de Cerámica y Vidrio (ICV),
Kelsen, 5, 28049, Madrid, España.

Resumen

Los materiales cerámicos basados en circonato-titanato de plomo, $\text{Pb}(\text{Zr,Ti})\text{O}_3$ (PZT), son muy conocidos por sus excelentes propiedades piezoeléctricas. Si bien, estos materiales se producen generalmente a partir de la técnica de mezcla de óxidos, la cual es relativamente simple y económica, en su formulación se emplea un alto contenido de óxido de plomo (aprox. 70%). Dado que el plomo y sus compuestos son considerados tóxicos y peligrosos, no sólo por la polución directa que genera el proceso de manufactura y maquinado de los compuestos, sino también porque los productos que contienen PZT no pueden ser reciclados, recientemente se han comenzado a investigar diferentes composiciones piezoeléctricas para su reemplazo. En este trabajo, se analizan algunos desarrollos propios en el campo de los materiales piezoeléctricos libres de plomo donde se enfatiza la correlación existente entre las propiedades finales, la microestructura desarrollada y la estructura estabilizada.

Abstract

Lead free piezoelectric ceramics based on $\text{Bi}_{0.5}(\text{Na}_{0.8}\text{K}_{0.2})_{0.5}\text{TiO}_3$ y $\text{K}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{NbO}_3$ systems. Ceramics based on lead zirconium titanate $\text{Pb}(\text{Zr,Ti})\text{O}_3$ (PZT) are well known for their excellent piezoelectric properties. These materials are generally produced by solid reaction technique, which is relatively simple and economical; however their production needs high lead oxide content (approx. 70%). Lead and its compounds are considered toxic and dangerous, due to direct pollution generated by the manufacturing process and machining of the compounds, and the inability to recycle products containing PZT. Therefore, other piezoelectric compositions based on lead free materials have begun investigated. In this paper, some developments in the field of lead-free piezoelectric materials, correlating the structure and microstructure with the properties materials properties are analyzed.

Key words: piezoelectrics; lead free; functional properties.

Introducción

La piezoelectricidad fue descubierta por Pierre y Jacques Curie en 1880 cuando estudiaban el efecto de la presión en la generación de cargas eléctricas en cristales de cuarzo y sales de Rochelle [1]. En efecto, el desarrollo de una carga eléctrica bajo la aplicación de una presión mecánica o viceversa es referido al efecto piezoeléctrico.

Uno de los mayores inconvenientes de los materiales piezoeléctricos de origen natural es su baja piezoelectricidad. Por lo que, recién en 1950 con el desarrollo de los materiales ferroeléctricos basados en PZT y en BaTiO_3 se pudieron desarrollar dispositivos con propiedades dieléctricas y piezoeléctricas elevadas [2,3], permitiendo su utilización en actuadores, sensores, condensadores y otra serie de dispositivos electrónicos y electromecánicos.

En general, las soluciones sólidas basadas en PZT se caracterizan por tener alta sensibilidad, confiabilidad y la capacidad de operar en un amplio intervalo de temperaturas. Si bien, estos materiales se producen generalmente a partir de la técnica de mezcla de óxidos, que es relativamente simple y económica, emplean un alto contenido de óxido de plomo (aprox. 70%) [4]. En la actualidad existe la necesidad de buscar materiales alternativos a los tradicionales PZT, debido a la volatilización del óxido de plomo durante el proceso de sinterización, a la extensa permanencia del plomo en el medio ambiente y a la acumulación de este elemento en los organismos que provoca daños en el sistema neurológico. Por este motivo, el plomo está siendo retirado de los procesos industriales según una normativa publicada por la Unión Europea [5]. En base a estas premisas, en los últimos años la búsqueda de nuevas composiciones libres de plomo se ha focalizado, entre otros, en sistemas basados en niobatos alcalinos y titanatos de bismuto.

Los cerámicos basados en el sistema $(\text{K}_{0.5}\text{Na}_{0.5})\text{NbO}_3$ (KNN) son considerados como posible reemplazo de los PZT, dado que presentan una transición de fase morfotrópica que incrementa las propiedades dieléctricas. Sin embargo, las principales desventajas del sistema $(\text{K}_{0.5}\text{Na}_{0.5})\text{NbO}_3$ son la sensibilidad de sus propiedades con la composición y el complejo proceso de densificación [6]. El uso de diversos aditivos, tales como LiSbO_3 (LS), LiTaO_3 (LT), o SrTiO_3 [7-8], constituyen una vía alternativa para incrementar la densificación y sus propiedades piezoeléctricas con métodos tradicionales de sinterizado.

Composiciones basadas en $\text{Bi}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{TiO}_3$ (BNT) y $\text{Bi}_{0.5}\text{K}_{0.5}\text{TiO}_3$ (BKT) también se encuentran en estudio debido a sus excelentes propiedades piezoeléctricas y ferroeléctricas en el límite de su fase morfotrópica romboédrica-tetragonal. Si bien, el BNT posee buenas propiedades piezoeléctricas, su alto campo coercitivo dificulta su polarización. Por ello, se estudia el uso de ciertos aditivos que disminuyan este campo o el uso de sistemas más complejos que involucren la formación de una solución sólida. Al respecto, el sistema binario BNT–BKT, en estado tetragonal, presenta propiedades piezoeléctricas similares a las de los compuestos ricos en plomo y, por lo tanto, pueden ser considerados como posibles sustitutos [9]. En este contexto, recientes publicaciones han reportado el uso de aditivos diferentes aditivos, tales como Li o Ta, que permitan reducir las temperaturas de sinterizado y potenciar los efectos piezoeléctricos del material [10-11].

Este trabajo tiene como objetivo repasar algunos desarrollos actuales en el campo de los cerámicos piezoeléctricos libres de plomo basados en sistemas $\text{Bi}_{0.5}(\text{Na}_{0.8}\text{K}_{0.2})_{0.5}\text{TiO}_3$ y $\text{K}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{NbO}_3$ analizando el efecto de algunos aditivos sobre las propiedades finales y los principales problemas inherentes a su aplicación.

Ferroeléctricos libres de plomo

Las perovskitas tipo ABO_3 (Figura 1), tales como $BaTiO_3$ (BT), $Bi_{0.5}Na_{0.5}TiO_3$ (BNT), $KNbO_3$, $NaTaO_3$ son materiales piezoeléctricos libres de plomo bastante conocidos. Estos cerámicos tiene constantes relativamente altas en comparación con los piezoeléctricos de origen natural. Sin embargo, sus principales problemas radican en la dificultad para polarizarlos, sinterizarlos o su baja temperatura de Curie [11-12].

Sistemas $Bi_{0.5}(Na_{0.8}K_{0.2})_{0.5}TiO_3$ BNT-BKT

Buhrer fue el primero, en 1962, en preparar y estudiar las fases presentes en el sistema BNT-BKT. Sus estudios revelaron la existencia de una temperatura de despolarización a concentraciones del 20 %mol de $Bi_{0.5}K_{0.5}TiO_3$ (BKT). No obstante, recién en 1996 [18] se descubrió que el fenómeno correspondía a una región bifásica central en composiciones conteniendo entre 10 y 30 %mol de BKT. En 1999 Sasaki y colaboradores [19] determinaron que en el sistema 80BNT-20BKT se presenta el límite de la fase morfotrópica entre BNT y BKT. Sin embargo, los mejores valores de constante dieléctrica (ϵ_r) y piezoeléctrica (d_{33}) se registran con 21 %mol de BKT donde las constantes alcanzan valores de 1030 y 46,9 pC/N, respectivamente [19]. Por este motivo, existen controversias sobre la existencia de este límite de la fase morfotrópica, dado otros autores [20] han reportado dicho límite de fase también a 20 y 14 %mol de BKT.

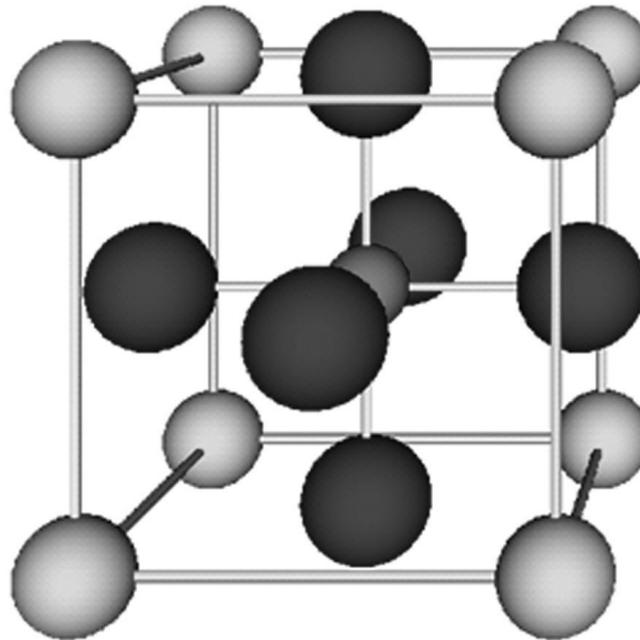


Fig. 1. Celda unidad de la perovskita ABX_3 . Estructura de la perovskita. Las esferas ubicadas en las caras del cubo representan átomos de oxígeno, la esfera central es el pequeño catión B, y las ubicadas en los vértices son los cationes A más voluminosos.

La fabricación de cerámicos con composición 80BNT - 20BKT requiere temperaturas de sinterizado más bajas que las correspondientes al sistema BNT - $BaTiO_3$ debido a la menor temperatura de volatilización y puntos de fusión del BKT. Un estudio del proceso sinterización del BNT - BKT con contenidos del 18 al 22 % en moles de BKT muestra

valores óptimos de d_{33} y polarización remanente para las muestras sinterizadas a 1150 °C [21]. Sin embargo, la mayor densidad relativa de las muestras no siempre se relaciona con las más altas propiedades piezoeléctricas. Otro inconveniente que presentan estos sistemas es la evaporación del bismuto, que se produce a partir de 1130 °C y genera la consecuente formación de fases secundarias. En este sentido, Camargo y colaboradores [14] encontraron que al aumentar la temperatura de sinterizado en sistemas pre-activados mecanoquímicamente se produce una excesiva formación de fases secundarias. La Figura 2 muestra los resultados de espectroscopia Raman Confocal de estas investigaciones relacionadas con el incremento en la formación de fases secundarias ricas en $K_{2-x}Na_xTi_6O_{13}$ junto a BNKT en sistemas de BNT-BNKT obtenidos por reacción en estado sólido previa activación mecanoquímica de los precursores por dos horas en molino planetario. Aunque, la fase secundaria es ferroeléctrica y favorece el proceso de densificación y polarización, su presencia no permite obtener constantes piezoeléctricas más elevadas que 100 pC/N.

Sistemas $K_{0.5}Na_{0.5}NbO_3$

El sistema basado en niobato de sodio potasio (KNN) es un material ferroeléctrico con una estructura de perovskita compleja, dado que los lugares de los sitios A son compartidos por más de un catión (Na y K). El sistema mixto KNN tiene una estructura ferroeléctrica ortorrómbica de niobato de potasio (KN) que muestra las transiciones de fase similares a las del $BaTiO_3$, pero a temperaturas más altas [22, 23] y niobato de sodio ortorrómbica (NN), que posee un comportamiento antiferroeléctrico [24]. Si bien, Shirane y colaboradores [23] reportaron que los cerámicos de composición KNN poseen un comportamiento ferroeléctrico, ellos no identificaron la transformación de 50/50 de potasio y sodio. Este borde de fase fue recién reportado por Egerton y colaboradores en 1959 [25].

Tabla I. Propiedades dieléctricas y piezoeléctricas de piezoeléctricos libres de plomo basados en sistemas BNT-BKT y KNN.

Formulación	ϵ_{33}	$\tan\delta$	d_{33} (pC/N)	Ref.
$BaTiO_3$	5444	0,020	66	[13]
$Bi_{0.5}(Na_{0.5}K_{0.2})_{0.5}TiO_3$	1050	0,040	100	[14]
$K_{0.5}Na_{0.5}NbO_3$	352	0,130	86	[15]
$(K_{0.44}Na_{0.52}Li_{0.04})(Nb_{0.86}Ta_{0.10}Sb_{0.04})O_3$	880	0,010	230	[16]
$(K_{0.44}Na_{0.52}Li_{0.04})(Nb_{0.86}Ta_{0.10}Sb_{0.04})O_3$ Con premezclado de los reactivos destinados a ocupar los sitios B	685	0,005	170	[17]

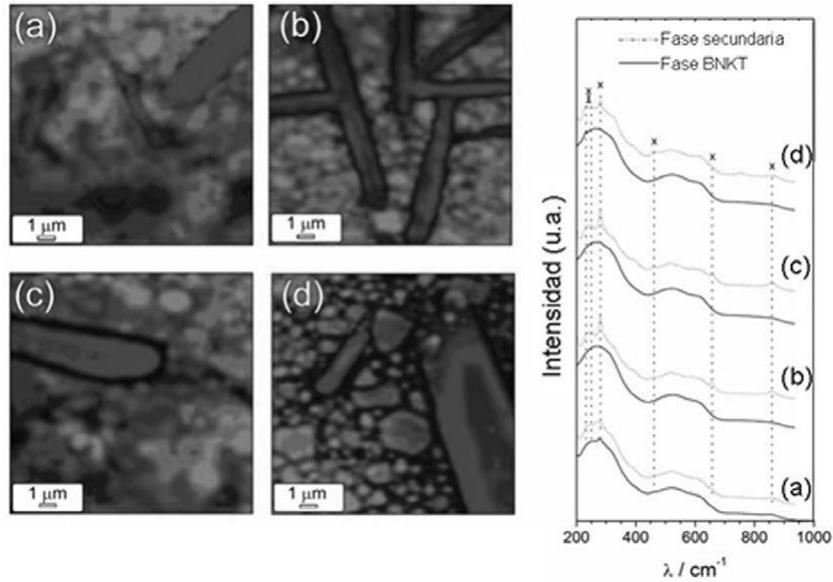


Fig. 2. Espectroscopia de Raman confocal de BNT-BKT sinterizado a diferentes temperaturas (a, 1075°C), (b, 1100°C), (c, 1125°C) y (d, 1150°C). El lado izquierdo de la figura presenta las imágenes de Raman de muestras que exhiben BNT-BKT (fragmentos más pequeños), junto a fase secundaria de base KNT (fragmentos mayores). Las imágenes de Raman se derivan de la suma de la intensidad total del espectro de píxeles de 50 cm⁻¹ a 950 cm⁻¹. El lado derecho de la figura representa el espectro Raman normal del BNT-BKT y fase secundaria, respectivamente.

El sistema $K_xNa_{1-x}NbO_3$ posee varias transiciones de fase inducidas térmicamente y límites de fase morfológica (LFM) como se muestra en la Figura 3. A temperatura ambiente, el LFM se encuentra a 17,5; 32,5 y 47,5 %mol de NN. Es interesante notar que presenta transiciones de fase ferroeléctricas a ~200 °C y paraeléctrica a ~400 °C casi independientes de la composición. Sólo pequeñas sustituciones de sodio por potasio en $NaNbO_3$ son suficientes para generar una transición de comportamiento antiferroeléctrico (Región P) a ferroeléctrico (Región Q).

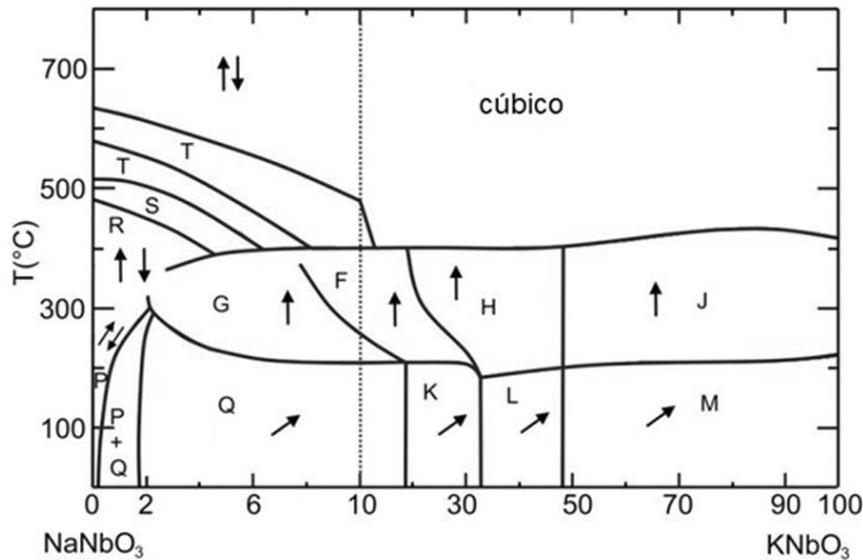


Fig. 3. Diagrama de fases de $K_xNa_{1-x}NbO_3$. Las regiones Q, K y L son monoclinicas, mientras que las M y G son ortorrómbicas; las F, H y J son tetragonales. Por último, la región P es ortorrómbica antiferroeléctrica.
Sistema $(K_{0.44}Na_{0.52}Li_{0.04})(Nb_{0.86}Ta_{0.10}Sb_{0.04})O_3$ (KNL-NTS)

Al igual que el sistema BNT-BKT, el KNN es difícil de sinterizar debido a la pérdida de elementos alcalinos durante el tratamiento térmico y a la morfología de sus granos (Figura 4) [26]. Si bien estos cerámicos no presentan una constante piezoeléctrica muy elevada (~ 90 pC/N) [27], ellos pueden ser dopados con diferentes elementos (calcio, bario, zirconio y cobre) para mejorar sus propiedades piezoeléctricas y/o facilitar el sinterizado. Estas modificaciones permiten el empleo de estos materiales en algunas aplicaciones piezoeléctricas, debido a la obtención de una buena relación entre las propiedades piezoeléctricas y dieléctricas que facilitan la polarización del material.

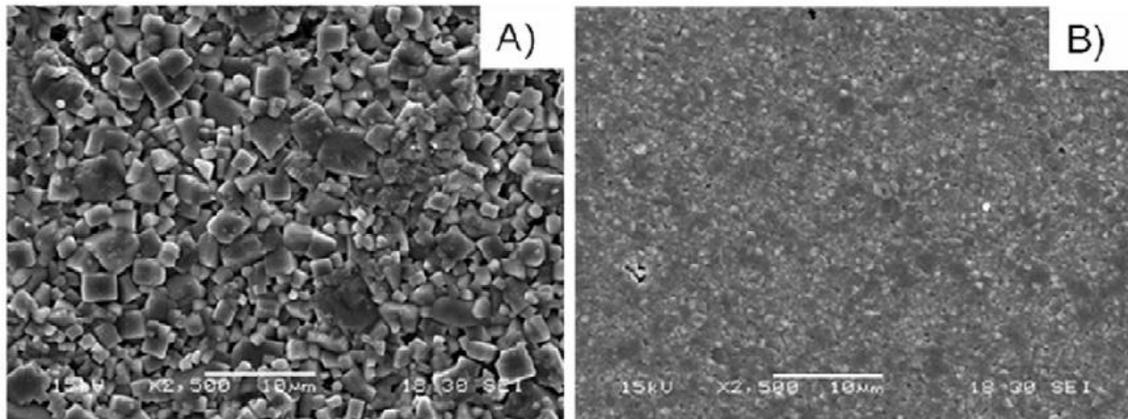


Fig. 4. Micrografías electrónicas de barrido de KNN puro (A) y KNN dopado con 0,5 %mol de ZrO₂ (B).

Saito y colaboradores descubrieron que la incorporación simultánea de aditivos como litio, tantalio y antimonio sobre el límite de la fase morfotrópica (LFM) del sistema KNN incrementa las propiedades piezoeléctricas hasta valores superiores a los 400 pC/N, en sistemas texturados, y 300 pC/N, en sistemas no texturados, mientras reduce la temperatura de Curie (T_C) de 400 a 250 a 280 °C [28].

El efecto de los constituyentes empleados originalmente por Saito y colaboradores [29] puede individualizarse del siguiente modo. El tantalio (Ta) dificulta el crecimiento anormal del grano y disminuye las temperaturas de Curie (T_C) y de transición ortorrómbica-tetragonal (O-T). El litio (Li) disminuye la temperatura de transición O-T hasta temperatura ambiente cuando sustituye al 6 % de los sitios A de las perovskita, mientras que incrementa la T_C y mejora la densificación. Algunas investigaciones reportan que con el agregado de litio es posible alcanzar constantes piezoeléctricas de 300 pC/N y T_C superiores a 350 °C-[29]. El efecto de la adición de LiSbO₃ es similar a la de LiNbO₃, excepto que requiere menos de 1 %mol para cambiar la transición O-T a temperatura ambiente.

Si bien, los resultados de Saito y colaboradores fueron promisorios, al presente, existen discrepancias en cuanto a la composición de la fase morfotrópica (LFM) del sistema KNN con LiTaO₃ (LT) [30]. Además, se han evidenciado otros inconvenientes provenientes del costo del tantalio que impide la aplicación industrial a gran escala, de la pérdida de los elementos alcalinos a la temperatura de sinterizado y de la estabilidad de la temperatura de polarización. Hollenstein y colaboradores [31] mostraron que la realización de ciclos térmicos a través de la transición O-T provoca una reducción en las propiedades finales de hasta el 30 %. Estos problemas pueden incrementarse cuando el contenido de litio llega hasta 6 %mol, debido a una mayor contribución al descenso de la temperatura de la transición de fase [32].

Recientemente, Ramajo y colaboradores [17] reportaron que el pre-mezclado de los reactivos (Nb₂O₅, Ta₂O₅ y Sb₂O₅) que contienen los elementos destinados a ocupar los sitios B

de la perovskita, en formulaciones tipo KNL-NTS, incrementa la temperatura de Curie (ver Figura 5). Contrariamente a lo esperado, este proceso no mejora lo homogeneidad, debido a la segregación del tantalio y a la formación de fases secundarias con estructura de bronce de tungsteno (BT). Sin embargo, esta modificación en el procesamiento permite obtener materiales con aceptables relaciones d_{33}/ϵ_{33} y mayores temperaturas de Curie para aplicaciones en generación de energía (ver Tabla 1).

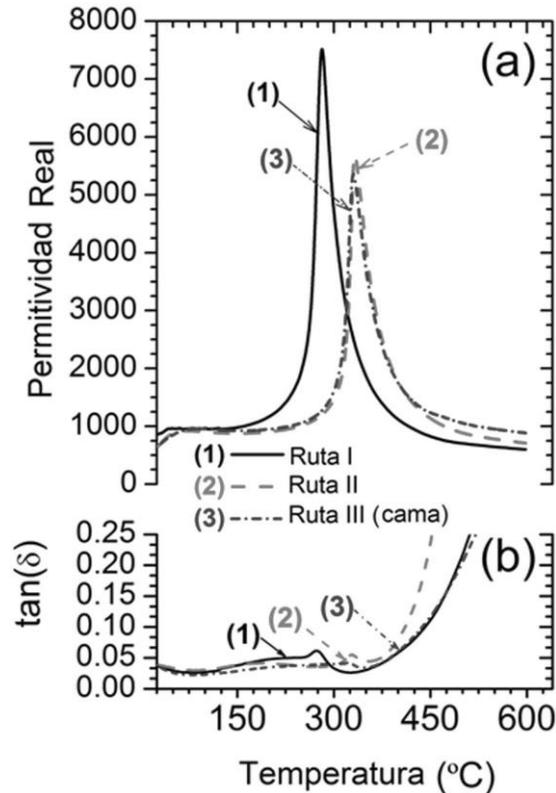


Fig. 5. a) Curvas de permitividad real y **b)** tangente de pérdidas en función de la temperatura de KNL-NTS (a 50 kHz). Las rutas de procesamiento representadas en la figura son las siguientes (I) reacción en estado sólido sin premezclado de precursores; (II) pre-mezclado de los reactivos que contienen los elementos que luego ocupan los sitios B en la perovskita; (III) pre-mezclado de los reactivos que contienen los elementos que luego ocupan los sitios B en la perovskita y sinterizado en cama de polvo KNL-NTS.

Conclusiones

En este trabajo se analizaron diferentes materiales piezoeléctricos libres de plomo basados en sistemas BNK-BKT y KNN con buenas propiedades dieléctricas y piezoeléctricas como posibles candidatos para sustituir a los tradicionales piezoeléctricos basados en PZT.

Tanto los sistemas basados en perovskitas de titanatos de sodio, potasio y bismuto, como en niobato de sodio y potasio presentan condiciones adecuadas para aplicaciones como actuadores y de alta potencia con valores de constante piezoeléctrica, d_{33} , superiores a 100 pC/N y temperatura de Curie (T_c) superiores a 200 °C. Para aplicaciones relacionadas con la generación de energía, los compuestos pertenecientes al sistema KNL-NTS presentan una buena relación d_{33}/ϵ_{33} y una buena estabilidad de las propiedades.

Finalmente, los desarrollos actuales indican que a fin de sustituir los sistemas basados en la composición PZT, será necesario que se formulen composiciones especiales libres

de plomo para cada aplicación dado que, al presente, no se ha encontrado un material piezoeléctrico libre de plomo que pueda reemplazarlo en todas sus aplicaciones.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido posible gracias al apoyo económico del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), la Universidad Nacional de Mar del Plata (UNMdP), la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (ANPCyT) y la Comisión de Investigaciones Científicas de la provincia de Buenos Aires (CIC). Los autores también expresan su agradecimiento al proyecto MICINN (España) MAT2010-21088-C03-01, por su apoyo financiero. Dr. F. Rubio-Marcos también está en deuda con el CSIC por su contrato “Junta de Ampliación de Estudios” (ref. JAEDOC071), el cual está cofinanciado con fondos FEDER.

Referencias

- [1] J. Curie, P. Curie P. *Bulletin de la Societe Mineralogique de France*. **3**:90 (1880).
- [2] B.K.W. Kwok, T. Lee, S.H. Choy, H.L.W. Chan. *Piezoelectric ceramics*, Capítulo 8. Ed. por Ernesto Suaste-Gomez, Sciyo, 2010.
- [3] G.H. Haertling, *Piezoelectric and electro-optic ceramics in ceramic materials for electronics*, 2nd. Edit Marcel Dekker, New York, 1991.
- [4] E. Ringgaard, T. Wurlitzer, *J. Eur. Ceram. Soc.* **25**, 2701 (2005).
- [5] RoHS 2002/95/CE. http://ec.europa.eu/environment/waste/weee/index_en.htm
- [6] L. Wu, D. Xiao, J. Wu, Y. Sun, D. Lin, J. Zhu, P. Yu, Y. Zhuang, Q. Wei. *J. Eur. Ceram. Soc.* **28**, 2963 (2008).
- [7] S. Zhang, R. Xia, T.R. Shrout, G. Zang, J. Wang. *Solid State Commun.* **141**, 675-679 (2007).
- [8] M.S. Kim, D.S. Lee, E.C. Park, S.J. Jeong, J.S. Song. *J. Eur. Ceram. Soc.* **27**, 4121 (2007).
- [9] A. Ullah, C.W. Ahn, A. Hussain, I.W. Kim, *Curr. Appl. Phys.* **10**, 1367 (2010).
- [10] D. Lin, K.W. Kwok, H.L.W. Chan. *Solid State Ionics* **178**, 1930 (2008).
- [11] B. Wang, L. Luo, F. Ni, P. Du, W. Li, H. Chen. *J. Alloys Compd.* **526**, 79 (2012).
- [12] T. Takenaka, H. Nagata. (2005) *J Eur Ceram Soc* **25**, 2693 (2005).
- [13] H. Maiwa, *Advances in Ceramics - Charter 1*. CC BY-NC-SA 3.0 license (2011).
- [14] J. Camargo, L. Ramajo, F. Rubio-Marcos, M. Castro. *Bol. Soc. Esp. Ceram. V.*, **53**, 27 (2014).
- [15] L. Ramajo, R Parra, MA Ramírez, MS Castro, *Bull. Mater. Sci.*, **34**, 1213 (2011).
- [16] L. Ramajo, M.S. Castro, F. Rubio-Marcos, J. Fernandez-Lozano, *J. Mater Sci.: Mater. Electronics*, **24** 3587 (2013).
- [17] L. Ramajo, M.S. Castro, A del Campo, J.F. Fernandez, F. Rubio-Marcos, *J. Eur. Ceram. Soc.*, DOI: 10.1016/j.jeurceramsoc.2014.02.002.
- [18] O. Elkechai, M. Manier, and J. P. Mercurio, *Physica Status Solidi A: Appl Research*, **157**, 499 (1996).
- [19] A. Sasaki, T. Chiba, Y. Mamiya, E. Otsuki, *Jpn. J. Appl. Phys*, **38**, 5564 (1999).
- [20] G. O. Jones, J. Kreisel, and P. A. Thomas, *Powder Diffraction*, **17**, 301 (2002).
- [21] T. Yu, K. W. Kwok, and H. L. W. Chan, *Mater. Lett.*, **61**, 2117 (2007).
- [22] I. Fuyuno, *Nature*, **435**, 1026 (2005).
- [23] G. Shirane, R. Newnham, R. Pepinsky, *Physical Review*, **96**, 581 (1954).
- [24] E. A. Wood, *Acta Crystallographica*, **4**, 353 (1951).
- [25] L. Egerton and D. M. Dillon, *J Am Ceram Soc*, **42**, 438 (1959).

- [26] J. Taub, L. Ramajo, M. S. Castro, *Ceram Inter*, **39**, 3555 (2012).
- [27] L. Ramajo, J. Taub, M.S. Castro, *J. Mater Sci.: Mater. Electronics*, **25** 168 (2014).
- [28] Y. Saito, H. Takao, T. Tani, T. Nonoyama, K. Takatori, T. Homma, T. Nagaya, and M. Nakamura, *Nature*, **432**, 84 (2004).
- [29] P. Zhao, B.-P. Zhang, and J.-F. Li, *Applied Physics Letters*, **90**, 242909-3 (2007).
- [30] Y. Wang, D. Damjanovic, N. Klein, E. Hollenstein, N. Setter, *J. Am. Ceram. Soc.*, **90**, 3485 (2007).
- [31] E. Hollenstein, D. Damjanovic, N. Setter, *J. Eur. Ceram. Soc.*, **27**, 4093 (2007).
- [32] M. Matsubara, T. Yamaguchi, K. Kikuta, S. Hirano, *Jpn. J. Appl. Phys Part 1*, **44**, 6136 (2005).

Manuscrito recibido el 11 de abril de 2014.

Aceptado el 25 de abril de 2014.

AN INNOVATIVE DISCRETE EVENT SIMULATION TOOL TO IMPROVE THE EFFICIENCY OF A COMPLEX BEER PACKAGING LINE

Natalia Basán, Mariana Cóccola y Carlos Méndez

INTEC (UNL - CONICET), Güemes 3450, 3000 Santa Fe, Argentina
E-mail: cmendez@intec.unl.edu.ar

Abstract

Discrete event simulation (DES) techniques cover a broad collection of methods and applications that allow imitating, assessing, predicting and enhancing the behavior of large and complex real-world processes. This work introduces a modern DES framework, developed with SIMIO simulation software, to optimize both the design and operation of a complex beer packaging system. The proposed simulation model provides a 3D user-friendly graphical interface which allows evaluating the dynamic operation of the system over time. In turn, the simulation model has been used to perform a comprehensive sensitive analysis over the main process variables. In this way, several alternative scenarios have been assessed in order to achieve remarkable performance improvements. Numerical results generated by the DES model clearly show that production and efficiency can be significantly enhanced when the packaging line is properly set up.

Key words: optimization; simulation; packaging line

Resumen

Una herramienta innovadora de simulación de eventos discretos para mejorar la eficiencia de una línea compleja de envasado de cerveza. Las técnicas de simulación de eventos discretos (DES) abarcan una amplia colección de métodos y aplicaciones que permiten imitar, evaluar, predecir y mejorar el comportamiento de procesos complejos del mundo real. Este trabajo presenta un ambiente moderno de DES, desarrollado con el software de simulación SIMIO, para optimizar tanto el diseño y funcionamiento de un complejo sistema de envasado de cerveza. El modelo propuesto proporciona una interfaz tridimensional gráfica que resulta fácil de usar y permite la evaluación de la operación del sistema a través del tiempo. A su vez, el modelo de simulación se ha utilizado para llevar a cabo un análisis de sensibilidad sobre las principales variables del proceso. De esta forma, se han evaluado diferentes escenarios alternativos con el fin de conseguir notables mejoras en el rendimiento. Los resultados numéricos generados por el modelo DES muestran claramente que la producción y la eficiencia se pueden mejorar de manera significativa cuando la línea de envasado presenta una adecuada configuración.

Palabras clave: optimización; simulación; línea de envasado

1. Introduction

In the current context of increasingly competitive markets, production activities must be properly accomplished in order to ensure high quality products. This often translates into a better product presentation, which needs to fit today's market requirements. In this way, the demand growth and the trend to specialize the presentation of products are putting pressure on companies to perform more diversified tasks on their packaging lines, which have become more complex in the last years.

This paper aims to analyze the operation of the main packaging line of an international beer company located in Argentina. The simulation study is mainly motivated by the low efficiency of the line, according to the level desired by the managers. This implies a reduction on the current production level due to the packaging process is an essential stage in the whole production process.

The main objective of this work is to identify, analyze and reduce the causes affecting the productivity of the packaging line. Modern simulation techniques has recently emerged as proper tools to cope with complex decision making problems [1, 2]. Therefore, a comprehensive simulation-based model has been developed in order to determine the potential changes to improve the performance of the facility. The modern SIMIO modeling software was used for developing the simulation model. After being created and validated, different alternative scenarios (current, suggested and theoretical) were assessed in order to determine the more suitable line design and operation that allows increasing economical benefits [3].

The manuscript is organized as follows. Section 2 describes the main features of the bottling beer process. Afterwards, in Section 3, an explanation of how the simulation model was developed is given. Section 4 shows how simulation results are used to validate the performance of the current operation of the line and highlights its potential improvements. Finally, the article concludes with some discussion and remarks in Section 5.

2. Features of the beer production process

The beer production process involves eight manufacturing stages: (i) Malting, (ii) Malt Milling, (iii) Mashing, (iv) Cooking, (v) Wort Cooling and Clarification, (vi) Fermentation, (vii) Maturation, and (viii) Packaging. The amount and type of raw material to be processed in each stage depend on the beer type to be produced [4].

2.1. Packaging line

This work is focused on the packaging step. In a packaging line, the beer drawn from a holding tank is filled into bottles, which are then capped and labeled. A flowchart of a generic beer packaging process is depicted in Fig. 1.

The first operation in a packaging line is the depalletizing stage, where the empty bottles are removed from the original pallet packaging. Then, an inspection operation named 100% control is performed manually by an operator so that defective items or bottles that could harm machines on the line are removed. After that, bottles and drawers are separated and then sent to washer machines in different lines. The bottles must be rinsed with filtered water or air before being refilled. This physical and biological cleaning is performed to remove dirt, labels, adhesive, and foil from the glass bottles. The bottle enters then to a container inspector which controls that all cleaning agents that were used in the previous stage have

been removed. Next, a filling machine is used so that the beer drawn from a holding tank be filled into the clean bottles. After that, a cap is applied to each bottle to seal it. To ensure the quality of product, the filled and capped bottles are then sent to a pasteurization stage, where they are kept until “minimum durability date”. Once the bottles reach this date, they enter to a labeling machine where a label is applied to each one. Then, a level-cap inspection is performed to reject bottles that do not satisfy required characteristics as filling level, internal pressure, and missing labels and caps. Finally, the product is located into drawers, which are packed into pallets and warehoused, ready for sale.

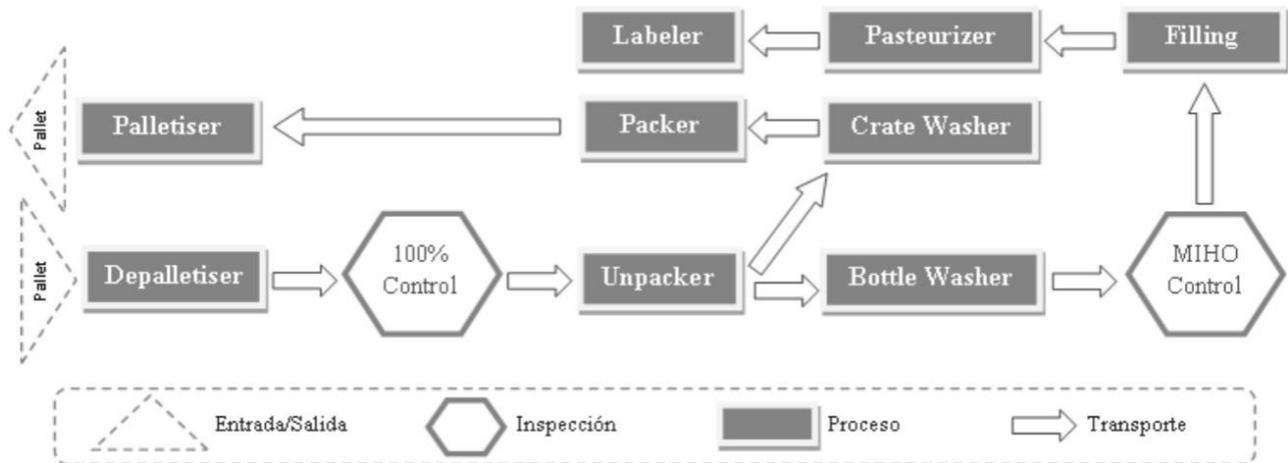


Fig. 1. Beer bottling process- 63 - C. Méndez. *Premio Alberto S.C. Fava en Cs. de la Ingeniería*

3. Simulation model of the beer packaging process

Process simulation and modeling tools have become an issue of increasing importance to the industry in process design and operation [5, 6]. The operation of a real-world process evolving over time can be studied in detailed by developing a discrete event simulation model [7].

To build a model, it is first necessary to understand how the real process is operated. In this way, all the necessary data from the brewing company under study was collected by using several alternative techniques [8]: (i) staff interviews, (ii) in-situ observation, and (iii) historical data collection, among others. The information gathered was then analyzed, filtered and documented [9]. Such procedure allows to identify critical points and potential problems to be solved in the current and desired operation of the packaging process [10,11].

Once data collection was completed, statistical analysis of data was performed to determine the probability distributions that best fit the data collected [12,13]. For this task, the Input Analyzer Arena simulation software was used [14]. The computational model was developed by using the SIMIO modeling environment. In order to represent the operation of the bottling line, the following components are to be considered within the model:

- Bottles, Drawers, and Pallets running on the line.
- Machines performing filling, labeling, and cleaning operations.
- Belt conveyors locating between machines.
- Operators working on the line.

3.1. SIMIO Simulation Software

SIMIO is a novel and innovative object-oriented modeling framework for flow simulation of complex discrete event systems and procedures. This computational tool allows building graphical animation models in both 2D and 3D, which simplify the viewing and validation of simulation results [15].

In SIMIO, each physical component of the real process, such as bottles or machines, is represented by an object with a predefined behavior, which can be extended by adding additional user procedures in the model. Three animation views of the simulation model are given in Fig. 2.

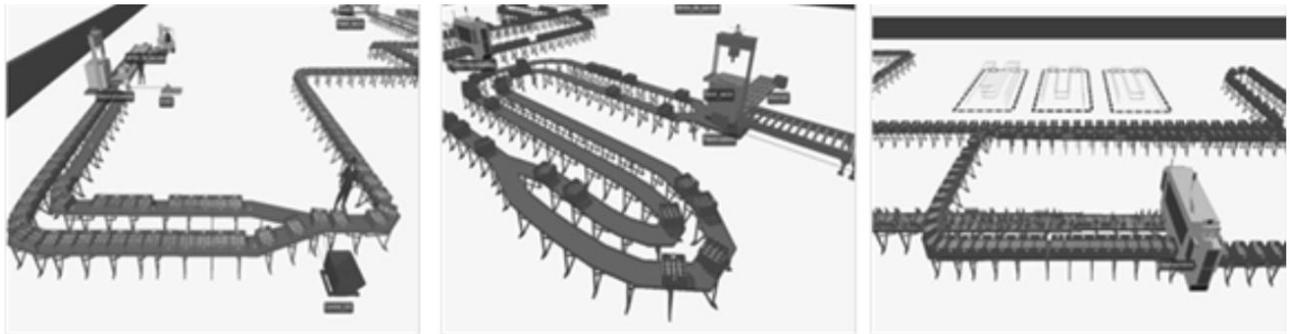


Fig. 2. 3D graphical views of packaging line

3.2. Packaging line model

Standard SIMIO objects as source, server, and sink, connected by paths, have been used to build the simulation model. A detailed description of how the bottling line has been modeled computationally is given below.

Pallets, Drawers, and Bottles: They are the dynamic entities processed on the line, as shown in Fig. 3.

The arrivals of pallets full of empty bottles are generated by a “Source Object”. Illustrated by Fig. 3, the bottles enter to the line once they are removed from their original pallet packaging by the depalletizer machine.

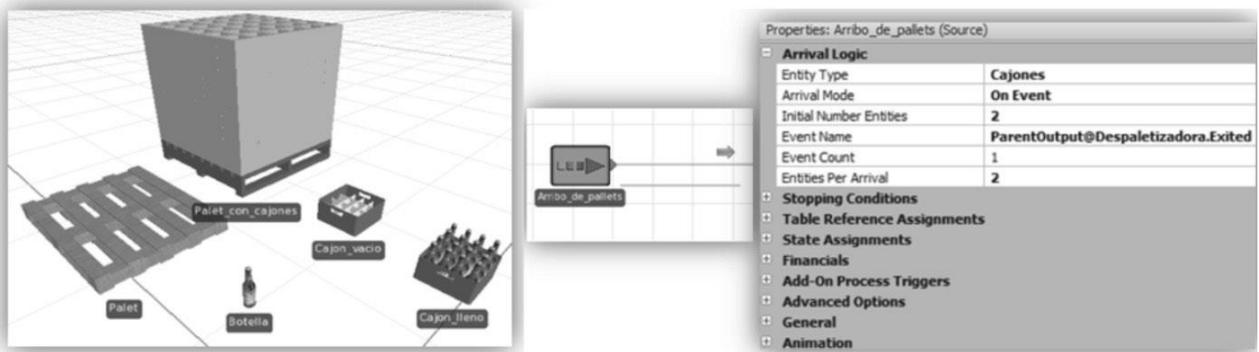


Fig. 3. Dynamic entities (bottles, drawers, and pallets) and pallets entity arrivals

Depalletizer Machine: As shown in Fig. 4, a “Separator Object” is used to represent how the depalletizer machine loads empty bottles from pallets onto the belt conveyor. The “Processing Time” property determines that each pallet is processed in 50 seconds while the “Copy Quantity” property specifies that 50 new entities, which represents a drawer full of empty bottles, are removed from every incoming pallet.

Unpacker Machine: Fig. 4 shows the “Separator object” representing to the unpacking operation, which is similar to the depalletizing one. In this second stage of the bottling line, 12 new entities, representing empty bottles, are removed from each entry drawer.

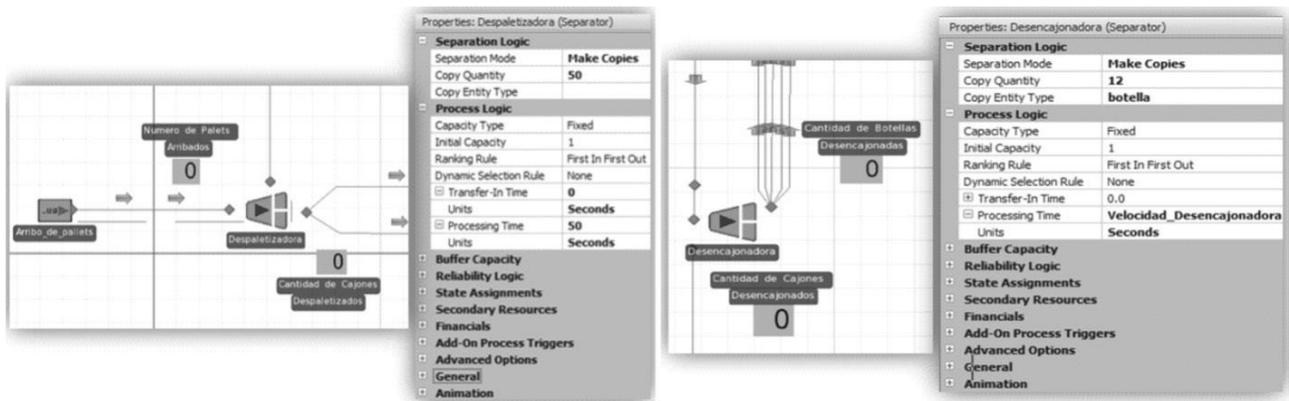


Fig. 4. 2D SIMIO model (depalletizer machine and unpacker machine)

Between the two operations described above, there is an additional process (Control 100%) that inspects the drawers entering to the line. In this way, a “SIMIO process”, which uses a probabilistic function, was defined to reject defective entities (see Fig. 5).

Bottles Washing: This operation is represented by placing 40 “Conveyor objects” into the SIMIO model. Each of them represents a real belt conveyor and can transport until 710 bottles. The input/output logic of this stage, described in Figure 5, assures that bottles will be within washing machine by at least 45 minutes.

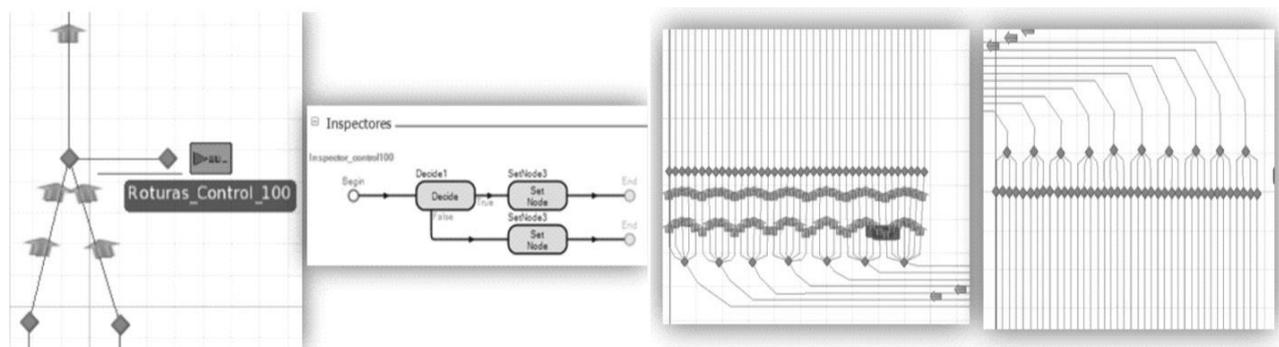


Fig. 5. 2D SIMIO model (Control 100% and washing machine)

Here, it is important to remark that SIMIO standard elements as “Event” or “Timer” have been used in order to represent input logic of the washing machine (see Fig. 6). The bottles enter the equipment through “hits”; there is a palette that, every 2 seconds, places 40 bottles onto “pocket inputs” for then being washed. To model this behavior, whenever a bottle wants to enter to the washing machine, it must wait until an event called

“Active_Washing” is activated. A “Timer element” is used so that such event can be triggered every 2 seconds. Thus, we ensure that each group of bottles will enter to the machine at the same time and consequently the input speed of the equipment is fulfilled.

Empty Bottles Inspector (MIHO): This process stage aims to verify the bottles that have been previously processed in the washing machine. As shown in Fig. 6, a “SIMIO basic node” is used to represent this operation. Such node has one input path and three output paths. The first output path receives the bottles that have a physical defect. The bottles that have some dirt are sent to the second one. Finally, the accepted bottles continue their normal processing to the third output path.

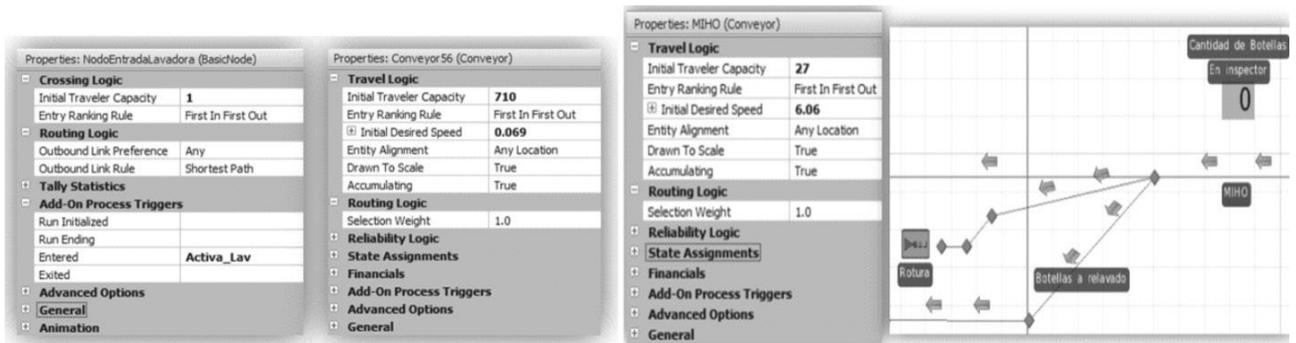


Fig. 6. 2D SIMIO model (input logic to washing machine and bottles inspector)- 65 - C. Méndez. Premio Alberto S.C. Fava en Cs. de la Ingeniería

Filling Machine: This operation has been modeled with a “Conveyor object”. As shown in Fig. 7, the “Initial Traveler Capacity” object property indicates that 154 bottles can be transported at the same time. Such carrying capacity is equal to the amount of filling valves. Next operation, capping, it is modeled with the same processing capacity of filling machine.

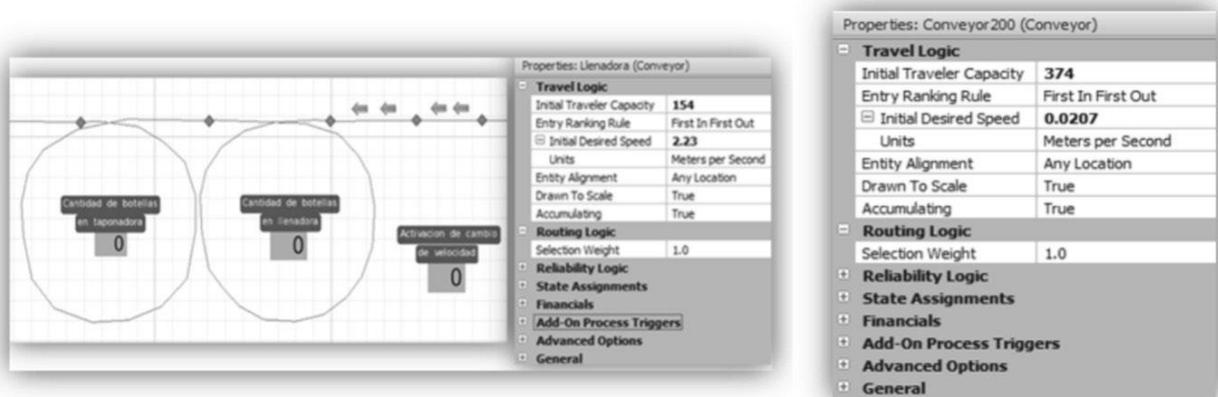


Fig. 7. 2D SIMIO model (filling machine and pasteurizing machine)

Pasteurizer Machine: This equipment has two floors which have been represented in SIMIO by 60 conveyors working in parallel (processing capacity). In this stage, bottles cross through “rainfall areas” that provide water at different temperatures (see Fig. 7 and 8).

Labeler Machine: This equipment unit has an operation similar to the filling machine (see Fig. 8).

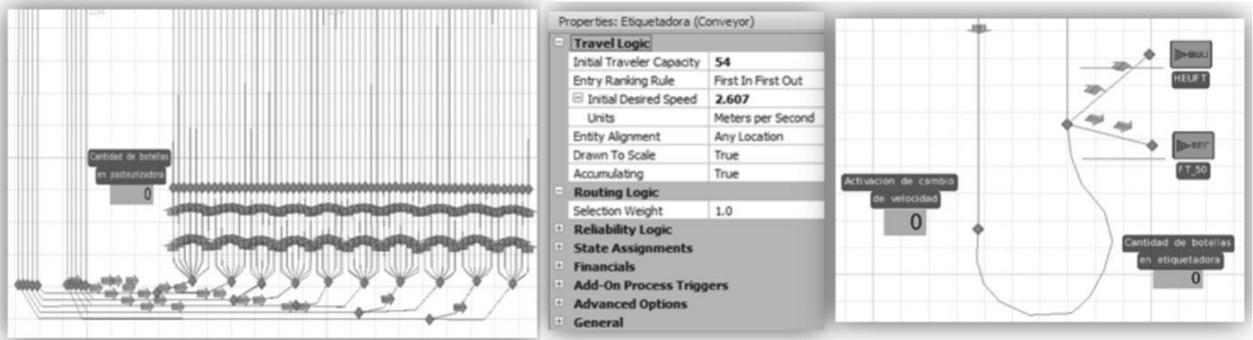


Fig. 8. 2D SIMIO model (pasteurizing machine and labeler machine)

Once bottles were labeled, two inspectors control them. This process is defined similarly to the Control 100% described above. In order to compute the total amount of rejected bottles, two “sink objects”, named HUEFT and FT_50, have been defined into simulation model.

Packer and Palletizer Machine: A “Combiner module” has been used to model the behavior of the packer and palletizer machine (see Fig. 9). For packing, 12 bottles are assembled into a drawer. After that, the palletizer machine puts together 50 drawers in a pallet (10 drawers per stack, 5 stacks per pallet). Then, the pallets are sent to the storage area which has been modeled with a “Sink module”.

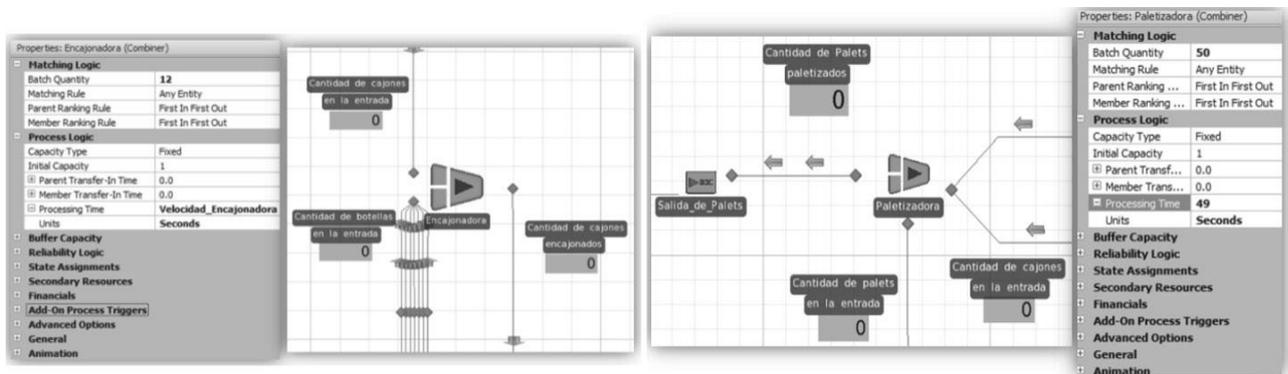


Fig. 9. 2D SIMIO model (packer process and palletizer process)

Accumulation Tables: Since the machines are exposed to internal faults, the accumulation tables guarantee the uninterrupted running of the beer bottling line. These tables assure that bottleneck equipment, in this case the filling and capping machine, may continue processing when either a lack of bottles in the input or bottle accumulation in the output takes place.

Along the packaging line, there are three accumulation tables, two for bottles and one for drawers. The first accumulation table is located between the empty bottles inspector and the filling machine (see Fig. 10). The second one is located between the pasteurizer equipment and the labeling machine, while the drawer accumulator is situated between the unpacker machine and the packer unit.

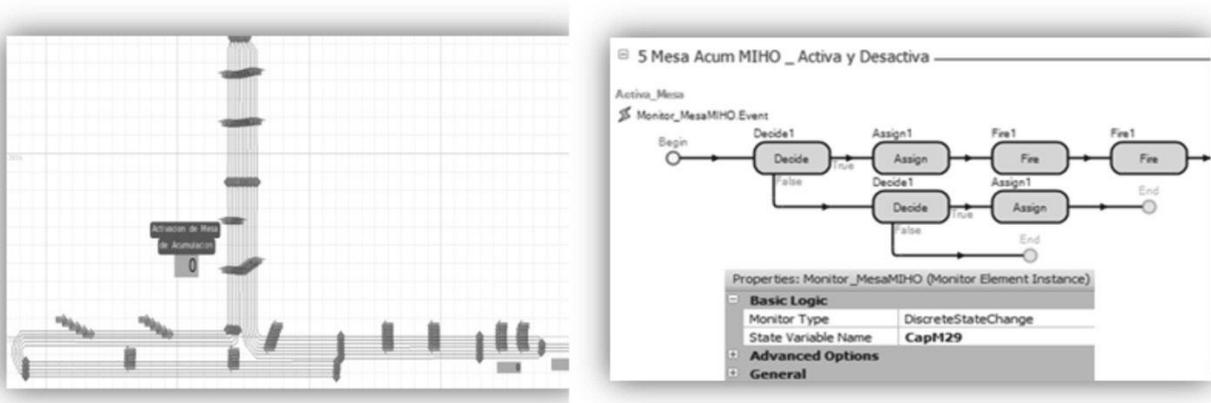


Fig. 10. 2D SIMIO model (accumulation table for bottles and monitor element)

Fig. 10 shows a “Monitor element” which has been used to control the capacity of the conveyor located above the accumulation tables for bottles. If this capacity changes, a process called “Activar_Mesa” is triggered by the monitor. This process verifies that the conveyor capacity does not exceed 90% of its maximum capacity. If this happens, the accumulation table is activated.

In addition, a binary variable named *Activar_Mesa_N* determines the current state of accumulation table N. If such table is activated, *Activar_Mesa_N* values 1; otherwise, it is set to zero.

Transports: There are two transport lines, one for bottles and other for drawers. “Basic Node elements” and “Conveyor objects” have been used to model such lines. From Fig. 11, it follows that conveyor objects have important properties to be set by the user such as speed, traveler capacity, and the option for accumulating or non-accumulating paths. The drawer line has single conveyors while the bottling line has variable width conveyors, which allow carrying from one to ten bottles in parallel (see Fig. 11).

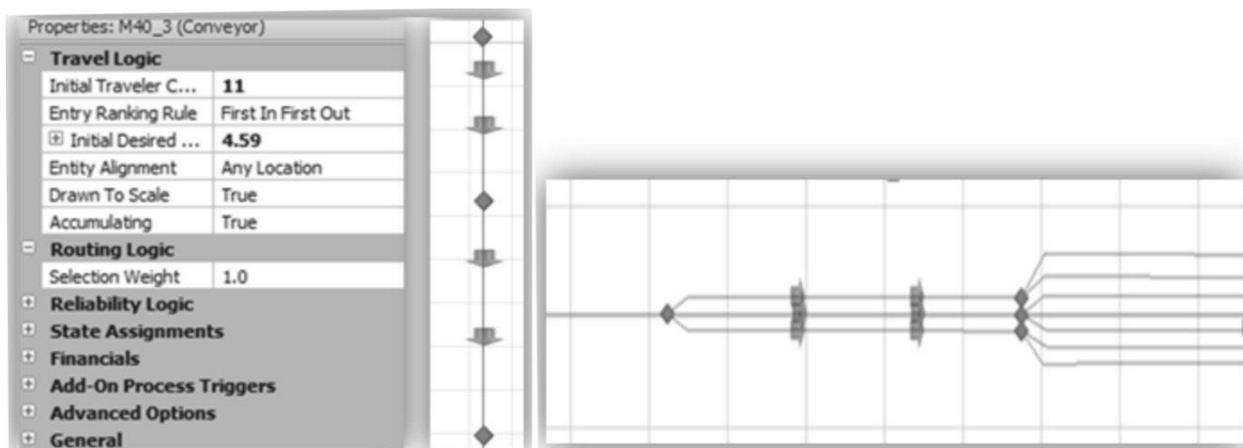


Fig. 11. SIMIO simulation software (conveyor properties and bottle conveying line)

Several SIMIO procedures, whose logic is embedded within “Basic Nodes elements”, were defined into the simulation model to integrate conveyors with variable carry capacities (see Fig. 12). Each defined procedure uses a discrete distribution so that the bottles

can be distributed on conveyors with available capacity. If one of them is above the limit of its capacity, other one in parallel must be chosen.

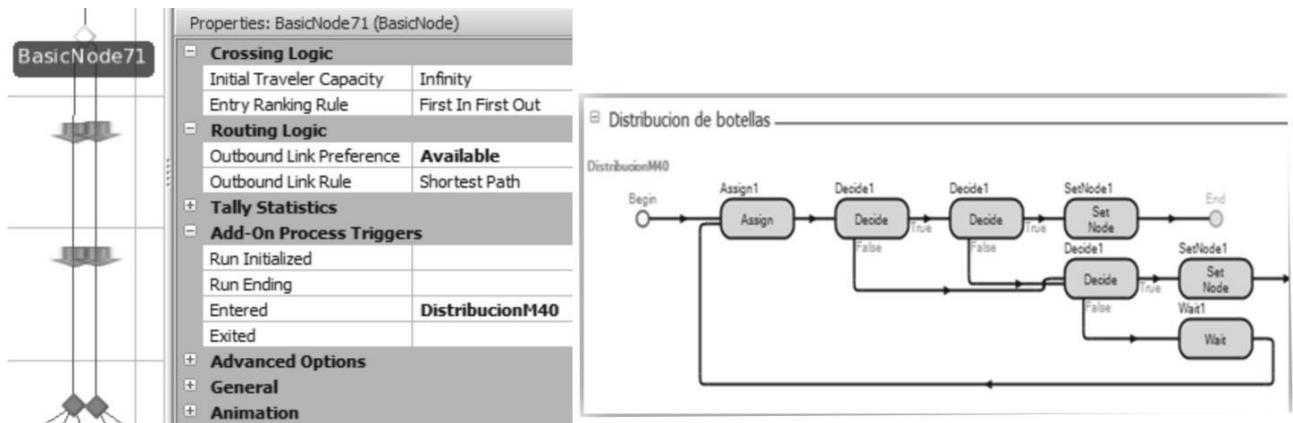


Fig. 12. 2D SIMIO model (distribution processes and bottles distribution)

Drawers Combiner: On the belt conveyor of drawers, there are two combiners which aim to join two lines into a single or reversely (see Fig. 13). The first combiner is located after the depalletizer machine, more precisely where Control 100% is performed. The second combiner is situated before palletizer machine and its function is to divide the belt conveyor from the packer machine in two lines.

A set of SIMIO procedures has been defined to explicitly represent the behavior of the two drawer combiners, as represented in Fig. 13. Since the capacities of the two conveyors involved in the combiners are different, more drawers are taken from the largest one in order to maintain a balance in the accumulation of the conveyors. It is worth to remark that when one conveyor is moving, the other stops running.

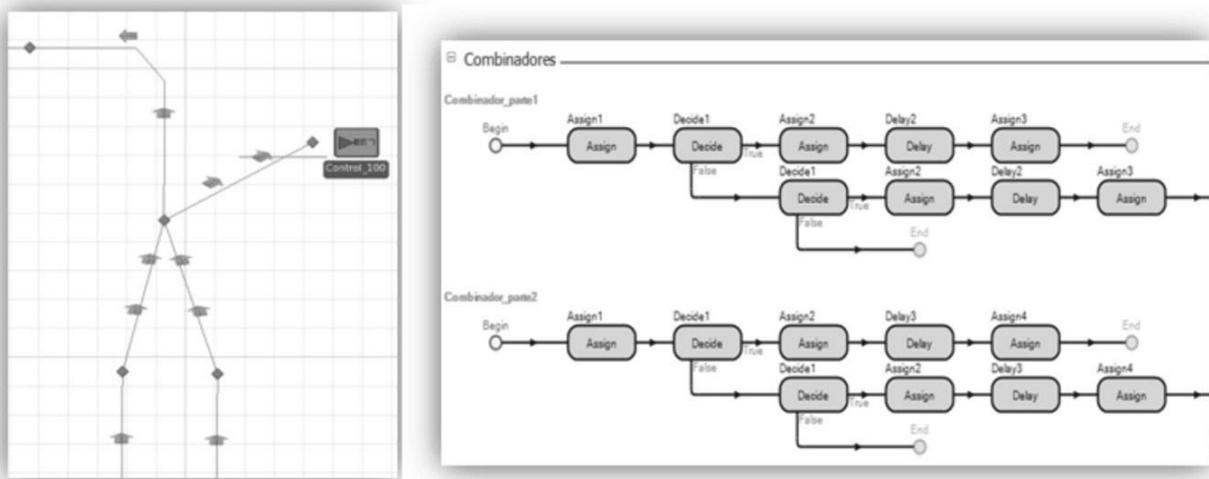


Fig. 13. 2D SIMIO model (Drawers combiner) and SIMIO processes

Sensors: Under normal operating conditions, machines on the packaging line work independently. It avoids that compatibility problems can appear when different equipments are put together on the same packaging line. However, some issues can emerge when

operations are not properly coordinated. As a result, equipment should be monitored individually and a considerable time is spent in starting up and shutting down operations.

Several sensors control the number of bottles or drawers on the line. Such devices, located on strategic points of the belt conveyors, emit signals so that conveyors or machines can start or stop their activities. Sensors are switches that are activated or deactivated according to whether they are in contact with the object. To represent the above behavior, three monitors have been defined for incoming and outgoing conveyors of each machine (see Fig. 14). If a capacity change is detected in them, the monitors trigger a process determining the speed at which the equipment should operate. For example, if there is no accumulation in incoming conveyors and there are drawers on the outgoing line, the unpacker machine operates at low speed. Otherwise, if there is accumulation in the incoming conveyor, the machine is capable of running at a higher rate. In this way, three states are defined for each equipment: (i) stopped, (ii) low speed and (iii) high speed. A variable is used to determine the machine state at a given time. The alternative values of this variable are: 0 (if the machine is stopped), 1 (if the equipment is operated at low speed) or 2 (if the machine is running at high speed).

For filling and capping machines, sensors are used to monitor their incoming conveyors (see Fig. 14). If such lines are not full of bottles, both machines stop working. In turn, if the accumulation table, located after the bottle inspector machine, is activated, the filling equipment will run at a greater rate. The normal filling speed is of 550 bottles per minute while 600 bottles per minute are filled when the machine operates at high speed.

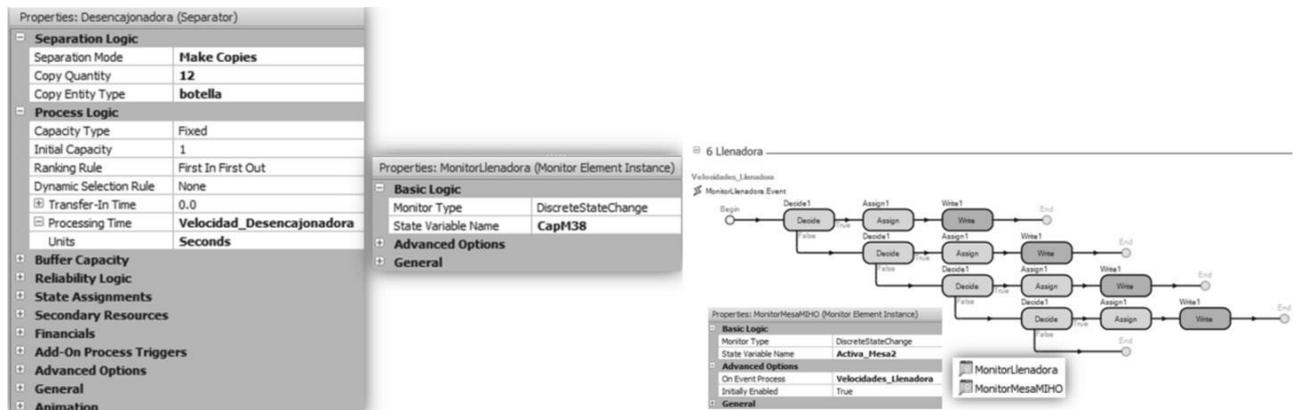


Fig. 14. 2D SIMIO model (Unpacker machine properties and Accumulation monitor features) and speed changes for filling and capping machine

4. Model Verification and Validation

One of the most important stages of a simulation project is the verification and validation of the model. In this work, the verification process was carefully performed first in order to assure that the computational model was adequately codified. Then, the validation process was accomplished. According to [7], the goal of validation is twofold: (i) to produce a model that represents true system behavior and (ii) to increase to an acceptable level the credibility of the model, so that the model will be used by managers and others decision markers. The results obtained from the validation procedure allowed to determine that the model behavior and the simulated output data resemble the real system.

4.1. Sensitivity Analysis

Once validation step was completed, alternatives scenarios were evaluated by experimenting with the simulation model. The goal was to determine the potential changes for performance improvement in existing facilities. In this way, the simulation model developed with SIMIO was run in an experimentation mode. One or more key properties of the model were modified to evaluate the impact on the whole system performance, mainly on the number of processed bottles in the filling machine, which is the bottleneck asset in the packaging line. The scenarios analyzed were as follows:

- Scenario 1 considering current system configuration.
- Scenario 2 establishing theoretical speeds of the machines with regards to line design ("V Line"). It is assured that the bottleneck asset is neither starved of material nor blocked due to any issues upstream and downstream respectively.
- Scenario 3 combining the features present in Scenario 2 with the option of using a drawer collector between packer and unpacker machine.
- Scenario 4 modifying Scenario 2 by changing the logic of drawer combiner located after the depalletizing machine.
- Scenario 5 modifying Scenario 2 by increasing conveyor speeds operating in the clean room.

Previous scenarios were defined in order to evaluate the following performance indicators:

- Filling machine efficiency: Taking into account the speed of filling machine, this parameter is determined by dividing the real amount of bottles that were filled during the simulation time by the number of bottles that should have been processed during the same time.
- Effective efficiency global indicator: Taking into account the speed of palletizer machine, this indicator is computed by dividing the amount of bottles processed during the simulation time by the theoretical number of bottles that should have been processed during the same time.
- Occupancy rate of belt conveyors: It allows analyzing and modifying the operation of conveyors that have a high occupancy.
- Number of pallets full of empty bottles entered to the bottling line vs. Number of pallets full of filled bottles produced: It indicates the productivity level achieved by the bottling line in a work shift of 8 hours.
- Changes in the speed and stability of the machines: The goal is to reduce machine downtime.

4.2. Results

The design of packaging line is based on the concept of "V Line". The filling machine speed, which is the bottleneck asset, is taken as reference to define the speed of machines located upstream and downstream. Their speeds are increased from 10% to 15% according to distance from filling machine. It is assured that the bottleneck asset is neither starved of material nor blocked due to any issues upstream and downstream, respectively. Table I shows the theoretical speeds at which machines should run according to a filling machine speed of 550 bpm while Table II gives a detailed of which are the current machine speeds on the line. Data in Table I and II is graphically shown in Fig. 15.

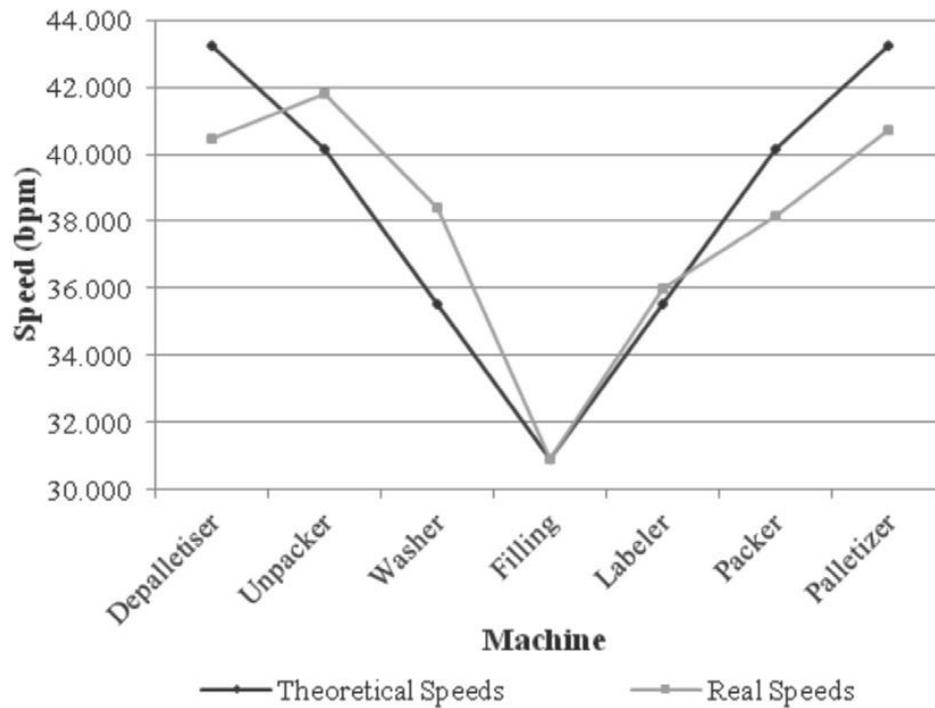


Fig. 15. “V” line with ideal and actual speeds

In addition, the productivity of packaging line is determined taking into account the equipment efficiency. This performance indicator is calculated as shown in Eq. (1). The theoretical number of bottles produced is derived from the filling machine speed, which is the bottleneck stage of the packaging line.

$$\text{Efficiency} = \frac{\text{Actual number of hottles produced}}{\text{Theoretical Number of bottles produced}} \quad (1)$$

Taking into account the production data of 3 consecutive months, Eq. (1) has been used in order to determine of productivity efficiency of each month analyzed. The results are presented in Table III. From this table, it follows that the packaging line has an average efficiency of 66.77%.

It is worth to remark that when the computational model was run to quantify the performance of packaging line, the simulation output reported a line efficiency of 66.8%. Other performance indicators, such as the number of pallet produced by work shift and the production rate in each machine, were considered to validate the model too. A comparison between the historical company data and the performance measures quantified by simulation is given in Table IV.

The inherent advantages of the simulation study are highlighted by evaluating the alternative scenarios specified above [8]. The results obtained in each of them are described below.

Table I. Analysis of theoretical speeds

	Machine Speeds (bph)	% Capacity of bottleneck asset
Depalletizer	43260	40
Unpacker	40170	30
Washer	35535	15
Filling	30900	0
Labeler	35535	15
Packer	40170	30
Palletizer	43260	40

Table II. Analysis of current speeds

	Machines Speeds (bph)	% Capacity of previous machine	% Capacity of bottleneck asset
Depalletizer	40440	-9.7	30.9
Unpacker	41820	8.9	35.3
Washer	38400	24.3	24.3
Filling	30900	0.0	0.0
Labeler	36000	16.5	16.5
Packer	38160	6.0	23.5
Palletizer	40740	6.8	31.8

Table III. Productivity Data

Month	Week	Amount of Bottles Produced		Average Efficiency (%)
		Current	Theoretical	
1	1	3187638	4752000	67.58
	2	3079862	4752000	
	3	3269809	4752000	
	4	2985746	4752000	
2	1	3082036	4752000	66.55
	2	3041290	4752000	
	3	3424400	4752000	
	4	3054792	4752000	
3	1	3155279	4752000	66.17
	2	3069707	4752000	
	3	3245196	4752000	
	4	3108242	4752000	

Table IV. A comparison between the performance of the real system and the simulation model

	Pallets produced per shift	
	Real System	Simulation Model
Despalletizer	283	282
Empty bottle inspector	280	278
Filling	277	275
Labeler	272	268
Packer	278	274
Palletizer	271	270

4.2.1. Results for Scenario 1

The use of simulation modeling to evaluate the current system configuration has returned as major result that the filling machine do not maintain a continuous operation and its speed changes over time. This is because downstream and upstream machines stops several times during production process. Fig. 16 shows the sequence of filling machine shutdown.

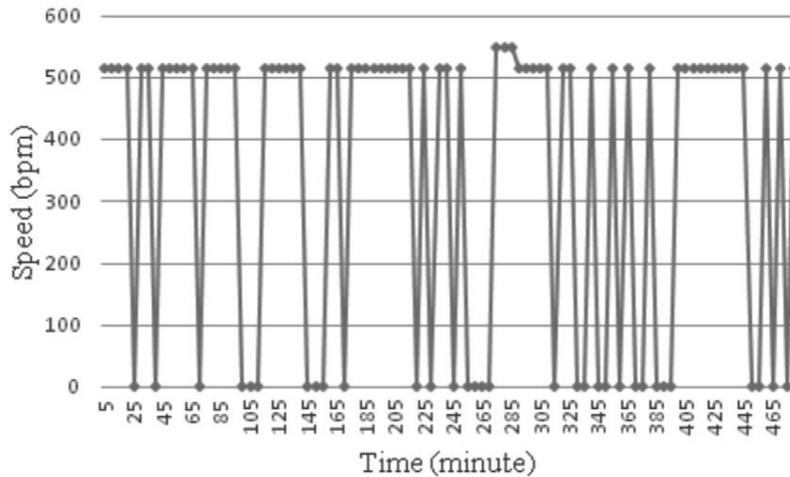


Fig. 16. Filling machine speed for Scenario 1

Besides, the use of simulation allowed to determine the level of accumulation of drawers and bottles between each machine. For scenario 1, results show an imbalance in two sectors of packaging line. On the one hand, there is an accumulation of bottles in the feeding-area, more precisely in one of conveyors located between the palletizer machine and the drawer combiner. On the other hand, a high accumulation of bottles takes place in the belt conveyor of the clean room, located between the bottle washing machine and the empty bottle inspector (see Fig. 17).

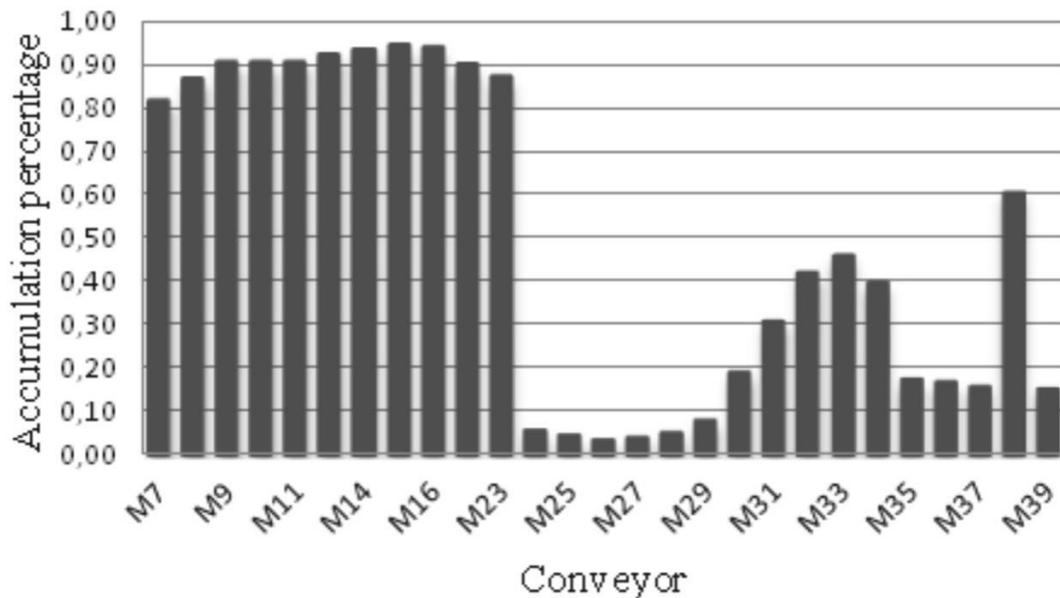


Fig. 17. Bottles accumulation in clean room conveyor for Scenario 1

It is important to remark that the conveyors located between the washing equipment and the inspector machinery should maintain a correct profile of accumulation so that the number of shutdowns of washing machine can be reduced. However, the operation of packaging line shows that there is a high level of accumulation of bottles in those conveyors actually.

Besides, a high accumulation in conveyors situated before depalletizing machine may cause that this equipment stops. Consequently, all operations upstream will be affected too. The sequences of shutdowns for depalletizer and unpacker machines are given in Fig. 18.

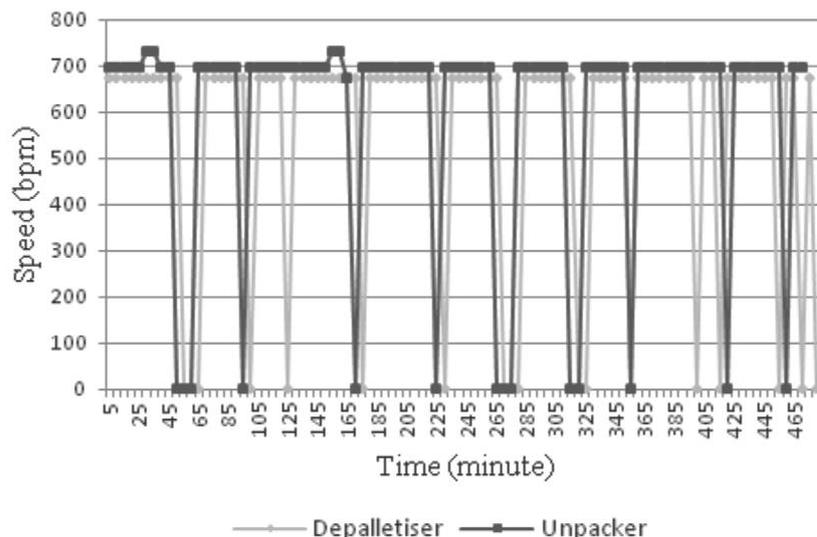


Fig. 18. Stoppages of depalletizer and unpacker machines for Scenario 1

4.2.2. Results for Scenario 2

The sequence of gearshifts in filling machine is shown in Fig. 19. From the comparison between the original and proposed speed variations, a higher number of shutdowns were observed in the bottleneck equipment. Hence, scenario 2 results in a lower stability of the line, a lower efficiency level of the filling machine (61.1%) and a lower global effective efficiency (58.4%). In turn, results show an imbalance accumulation in the conveyors of both the clean room and the feeding area, similar to previous scenario.

In order to increase throughput and efficiency of the packaging line without having to modify machine speeds, new alternatives from scenario 2 were proposed and their results are detailed below.

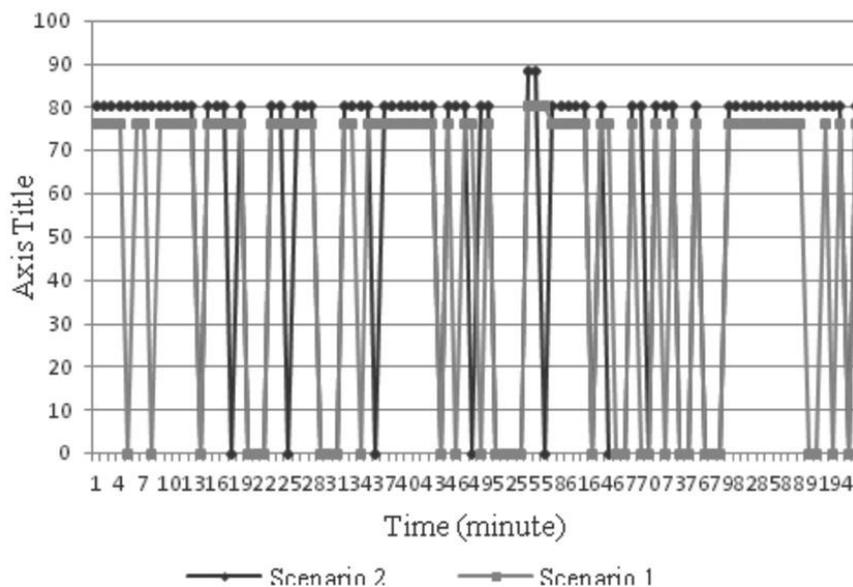


Fig. 19. Gearshifts in filling machine

4.2.3. Results for Scenario 3

In this case, the options of incorporating a drawer accumulator and an operator were considered in order to improvement the results of previous scenario. Three alternatives were proposed: (i) it includes a drawer accumulator, (ii) it includes an operator, and (iii) it considers both a drawer accumulator and an operator. For each of proposed alternatives, simulation results were analyzed in order to determine performance improvements. If a drawer accumulator is used, an efficiency of 61.2 is achieved. However, no significant changes were detected in the other cases with respect to the Global Effective Efficiency Indicator.

For a work shift, the operation speeds of unpacker and packer machines are shown in Fig. 20. From this picture, it follows that a significant reduction in the number of machine stops is achieved by using the drawer accumulator. However, the usage of critical equipment, the filling machine, was not upset and the amount of product palletized is maintained in 115400 bottles. This is so because the stoppage of machine is minimized by the design of packaging line, in which there are conveyors that acts as buffer between machines. Consequently, an investment from company is not justified because there is no impact on the performance of the line.

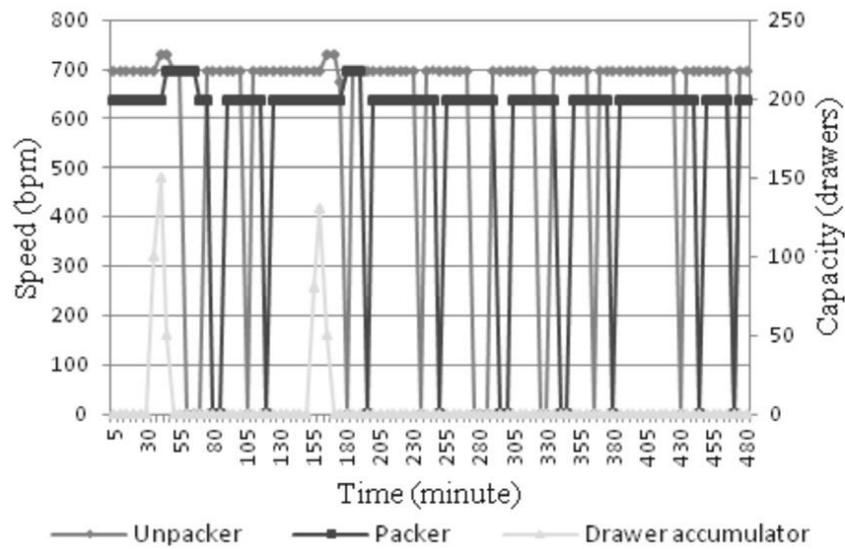


Fig. 20. Machine speeds for Scenario 3

4.2.4. Results for Scenario 4

In this scenario, two operation alternatives for the drawer combiner situated after the depalletizing machine were evaluated. The waiting time of combiner is changed in the first alternative while the number of drawers to be transported by each conveyor is modified in the second one.

Simulation results show that a reduction in the idle time was achieved for depalletizer machine and upstream equipments (see Fig. 21). Thus, a greater stability in the first equipment of the line is reached when some change is introduced in the feeding sector. Moreover, an efficiency of 67.2 % (177462 bottles filled) was reported by the simulation runs. Thus, scenario 4 represents the best alternative to improve the efficiency of filling machine by reducing the idle time of this bottleneck equipment. In addition, a reduction in the number of equipment stops is observed with respect to scenario 2 (see Fig. 21).

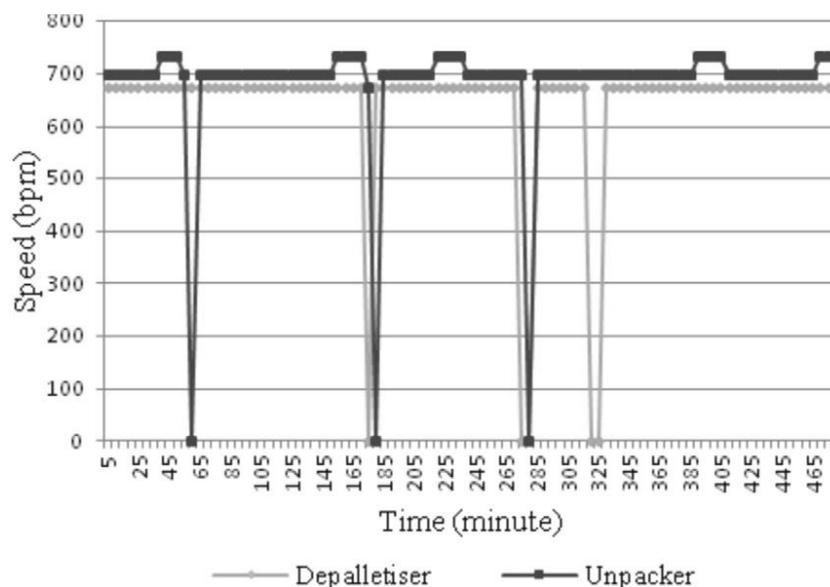


Fig. 21. Stops of depalletizer and unpacker machines for Scenario 4

4.2.5. Results for Scenario 5

This scenario evaluates the efficiency of the packaging line when the speed of conveyors located in the clean room is increased from 5% to 50%. Simulation results show that an important improvement in production level can be achieved when the conveyor speeds are increased by 25%. The performance of the bottleneck machine is shown in Fig. 22. From this picture, it follows that a growth in the stability of filling machines is achieved with regards to scenario 2 because the number of stops of this equipment is reduced. In addition, a high balance of bottles accumulated on the conveyor is observed (see Fig. 23). Consequently, the utilization rate of conveyors located between the inspector and filling machine is increased.

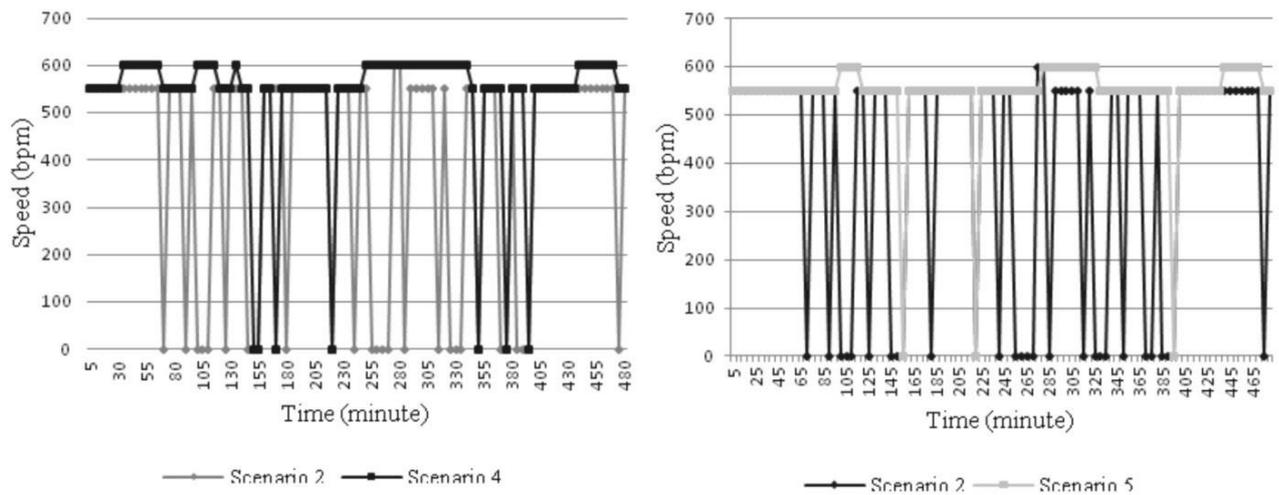


Fig. 22. Filling machine speeds for Scenario 5

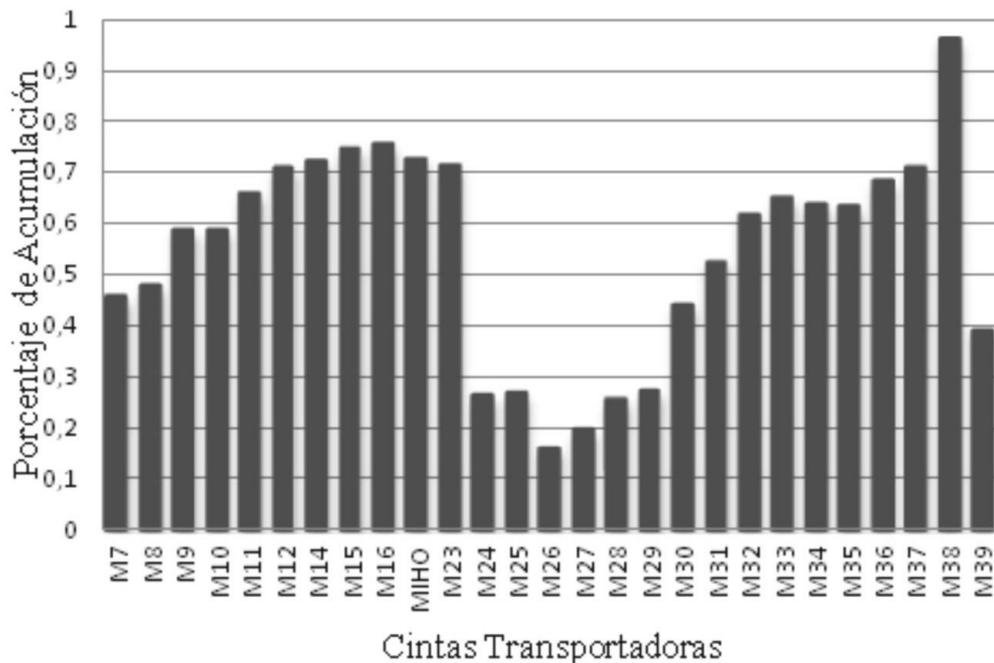


Fig. 23. Bottles accumulation on conveyors located in the clean room

4.2.6. Evaluation of Results

Having analyzed the most relevant scenarios, the major performance indicators reported in each of them are summarized in Table V and Table VI. Therefore, it is possible concluding that scenario 5 achieves the highest level of efficiency in terms of the bottleneck resource and also the highest level of overall effective efficiency. This results in a remarkable increase in the production of a rolling line and the use of machines and transports.

From Table VI, it follows that the efficiency can be increased at least 11.3% by introducing the proposed changes in scenario 5 to the actual configuration of the packaging line. Such changes can be realized with minimum cost and the improvements in the operation of the line will provide the required return on investment.

Table V. Summary of scenario results

Scenario	Processed in filling bottles	Processed in bottles depalletizer	Processed in bottles Palletizer
1	165059	157200	151800
2	161375	160200	154200
3	161512	162000	155400
4	177462	178800	175200
5	206200	211200	204000

Table VI. Summary of efficiency indicators

Scenario	% Efficiency	% Effective Global Efficiency
1	66,8	61,4
2	61,1	58,4
3	61,2	58,9
4	67,2	66,4
5	78,1	77,3

5. Conclusions

In this paper, an innovative discrete event simulation modeling tool has been used to quantify the performance of the main packaging line of an international beer company located in Argentina. The work aims to evaluate alternative scenarios in order to determine potential changes in the line configuration to maximize production and efficiency.

As main results, it has been possible to determine that the efficiency of bottleneck asset, in this case the filling machine, and the holistic performance of the line can be improved by optimizing machine speeds and the use of accumulators. In addition, short stops primarily derived from simple causes can be reduced drastically by avoiding complex operations on the machines, although there are also small stalls that can only be removed using sophisticated methods of analysis and operations with high technical content.

According to simulation results, the productivity of the packaging line is affected mainly by modifying the logic of conveyors belts located in the feeding area and clean room.

Moreover, the line is sensitive to changes in machine speeds, which are operating at a speed below the nominal speed.

It is worth to remark that for fixed values of speed and transport machines, no investment is needed by the company, because they have the materials and labor necessary for the modification of the same drivers. Moreover, the study remarks that not always increasing the efficiency ratio on a particular machine line, from the reduction of a kind of loss, produces an increased rate of holistic efficiency of the line. This is because the relationships and interactions in the real system are complex or some degree of uncertainty is present. The proposed model can be easily utilized and adapted to evaluate future changes in the operation and design of the main beer packaging line of the company. This work can also be modified to evaluate and improve the performance of beer packaging lines of other companies.

Acknowledgments

Financial support received from ANPCyT under grant PICT-2010-1073, from CONICET under Grant PIP-940 and from UNL under Grant PI-81-481 is fully appreciated.

References

- [1] A. Aguirre, V. Cafaro, C. Méndez & P. Castro, A simulation-based framework for industrial automated wet-etch station scheduling problem in the semiconductor industry. *Proceedings of the 23th. European Modeling & Simulation Symposium (EMSS2011)* 384-393 (2011).
- [2] A. Aguirre, E. Müller, S. Seffino & C. Méndez, Applying a simulation-based tool to productivity management in an automotive-parts industry. *Proceedings of the 2008 Winter Simulation Conference* 1838-1846 (2008).
- [3] R. E. Shannon, *Simulación de Sistemas. Diseño, desarrollo e implantación*, Trillas, México, 1988.
- [4] B. Kuo, *Automatic Control Systems*, 3rd Edit., Prentice-Hall, U.S.A., 1975.
- [5] J. Banks & K. Musselman, *Handbook of Simulation: Principles, Methodology, Advances, Applications and Practice*, John Wiley & Sons Edit., Inc. U.S.A., 1998.
- [6] T. Naylor, J. Balintfy, D. Burdick & K. Chu, *Técnicas de Simulación en Computadoras*, Editorial Limusa, México, 1991.
- [7] J. Banks, J.S. Carson, B.L. Nelson & D.M. Nicol, *Discrete-Event System Simulation*, 4th. Edit., Prentice-Hall U.S.A., 2004.
- [8] A. Law & W. D. Kelton, *Simulation Modeling and Analysis*, 2nd. Edit., McGrawHill, Inc., U.S.A., 1991.
- [9] M. Ross Sheldon, *Introduction to Probability Models*, 5th. Edit., Academic Press, N. Y., 1993.
- [10] N. Basán, L. Ramos, M. Cóccola & C. A. Méndez, Modeling, simulation and optimization of the main packaging line of a brewing company. *Proceedings of the 25th. European Modeling and Simulation Symposium (EMSS2013)* 551-560 (2013).
- [11] M.F. Gleizes, G. Herrero, D.C. Cafaro, C. A. Méndez & J. Cerdá, *Computer-Aided Chemical Engineering* 8, 1697 (2010).
- [12] W. W. Hines & D. C. Montgomery, *Probability and Statistics in Engineering and Management Science*, 3rd. Edit., Wiley, New York, 1990.
- [13] R. Walpole & R. Myers, *Probability and Statistics for Engineers and Scientists*, 4th. Edit., Macmillan, N.Y., 1989.

- [14] D. Kelton, R.P. Sadowski & D.T. Sturrok, *Simulation With Arena*, 4th Edit., McGraw-Hill Series in Industrial Engineering and Management Science, 2006.
- [15] R. Thiesing, C. Watson, J. Kirby & D. Sturrock, *SIMIO Reference Guide*, Version 6.0, 1990.

*Manuscrito recibido el 31 de marzo de 2014.
Aceptado el 25 de abril de 2014.*

VISUALIZACIÓN MOLECULAR DE PROCESOS CELULARES

Hernán E. Grecco

Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires e IFIBA (CONICET) Ciudad Universitaria, 1428-Buenos Aires, Argentina
E-mail: hgrecco@df.uba.ar

Resumen

La función celular emerge de la acción conjunta de moléculas nanométricas. Su interacción y movilidad forman patrones que se expanden por micrones a través de toda la célula. A su vez, estos patrones modulan las interacciones que los crearon cerrando un ciclo que cruza escalas espaciales y temporales. Entender cómo emerge la función celular de esta relación causal simultánea, requiere cuantificar fenómenos celulares con resolución molecular. En este trabajo de revisión mostraremos cómo los avances recientes en microscopía de fluorescencia permiten cuantificar la localización, movilidad e interacción de proteínas; y de esta forma la dinámica espacio-temporal de procesos celulares.

Palabras clave: microscopía; biología celular; señalización celular; movilidad molecular; interacciones

Abstract

Molecular visualization of cellular processes. Cellular function emerges from the complex interaction of nanometer sized molecules. Their mobility and interaction create patterns that span over microns throughout the whole cell. Those patterns, in turn, regulate the molecular interactions bridging time and length scales. Understanding such simultaneous bidirectional causation requires quantifying the spatio-temporal progression of cellular processes with molecular resolution. In this review article we will show how recent advances in fluorescence microscopy enable the quantification of protein localization, mobility and interaction; and in this way the spatio-temporal dynamics of cellular processes.

Key words: microscopy; cell biology; signaling; molecular mobility; interactions

Introducción

Medio siglo de biología molecular nos ha brindado un conocimiento de los componentes bioquímicos que forman los seres vivos. Sin embargo, y a pesar de las predicciones iniciales, aún estamos lejos de lograr un entendimiento profundo acerca como esos componentes dan lugar funciones de orden superior [1]. Efectivamente, ha quedado claro que el catálogo de los componentes genómicos de una célula no es suficiente para predecir su dinámica. La respuesta celular emerge principalmente de las múltiples interacciones entre sus componentes [2].

La célula se trata pues de una verdadera “ecología de moléculas” y su estudio posee algunas de las mismas dificultades [3]. Por ejemplo, **cada sistema es único** y su estado actual es determinado por una serie específica de eventos dificultando la preparación de otro sistema idéntico. Otra similitud es la **observabilidad parcial de sus componentes** que dificulta la determinación de los mecanismos y la estimación de sus parámetros. Finalmente la

complejidad de la célula evidenciada por la naturaleza combinatoria de las **interacciones entre sus componentes**.

Estas interacciones no son estáticas ni uniformes, sino que están moduladas temporal y espacialmente. Una de las formas en que las interacciones son moduladas es a través de la compartimentalización cuyo ejemplo más evidente es la célula misma. La membrana plasmática confina las reacciones bioquímicas en su interior protegiéndolas de los efectos entrópicos de la difusión [4]. Adicionalmente facilita ciertas reacciones bioquímicas al proveer una superficie donde la concentración efectiva de reactivos es mayor [5]. Este esquema se repite en otras escalas espaciales, por ejemplo subcelularmente en eucariotas con el núcleo, el retículo endoplasmático, los ribosomas y otras organelas. Compartimentalizar transforma el espacio en una nueva dimensión de cómputo, aumentando la capacidad del organismo para procesar información en paralelo [6].

Toda esta complejidad brinda al sistema la riqueza de sus respuestas, pero también interpone una dificultad para su estudio tanto teórico como experimental. No se trata sólo de estudiar un sistema de múltiples componentes interactuando (una tarea difícil de por sí), sino que además estos sistemas poseen una regulación espaciotemporal que es determinante para entender su funcionamiento [7].

En este trabajo de revisión mostraremos cómo los avances recientes en microscopía permiten cuantificar la localización, movilidad e interacción de proteínas; y de esta forma la dinámica espacio-temporal de procesos celulares.

Determinando la localización de proteínas

Por su capacidad para resolver estructuras por debajo de la resolución del ojo humano, la microscopía óptica ha sido una herramienta fundamental para la biología celular desde finales del siglo XVII cuando **Antonie van Leeuwenhoek** observó por primera vez organismos unicelulares. En esa misma época, **Robert Hook** acuñó la palabra célula para describir los compartimientos en plantas que le recordaban a las celdas en las que dormían los monjes. Hacia finales del siglo XIX la microscopía toma un nuevo impulso con la convergencia de distintas disciplinas. Entre otros, contribuyen **Ernst Abbe** al demostrar que el límite de resolución de un microscopio se relaciona con la inversa de la apertura numérica. **Otto Schott** desarrolla nuevos tipos de vidrio como el borosilicato que por su bajo coeficiente de dilatación permitió generar elementos ópticos más estables y que al combinar varios tipos de vidrio compensen aberraciones ópticas. **August Köhler** desarrolla el mecanismo de iluminación que lleva su nombre y permite una iluminación uniforme en intensidad y en frecuencias espaciales. Muchos de estos desarrollos se realizaron vinculados con **Carl Zeiss**, un óptico y emprendedor que fundó la empresa que lleva su nombre.

En la segunda mitad del siglo XX la microscopía dejó de ser una herramienta meramente cualitativa para tornarse cuantitativa, permitiendo medir con especificidad la distribución espacial y dinámica de varias moléculas de interés como proteínas, ácidos nucleicos y lípidos. Entre los descubrimientos que transformaron la microscopía óptica moderna, los más significativos fueron sin duda el descubrimiento de **la proteína fluorescente verde** y la invención del **microscopio confocal**.

La proteína fluorescente verde (GFP del inglés *Green Fluorescent Protein*) obtenida de la medusa *Aequorea victoria* fue la primera de muchas proteínas fluorescentes (FP) cuyos genes fueron aislados y secuenciados [8,9] para su posterior utilización como marcadores y reporteros [10]. La mayoría de las FP tienen un peso molecular cercano a 27 KDa y constan de

un barril de cadenas betas en el centro del cual se encuentran hélices alfas que contienen un cromóforo unido covalentemente. El cromóforo absorbe fotones de una longitud de onda (ej. Cyan ~480 nm) y emite a una longitud de onda mayor (ej. Verde ~ 510 nm). El barril excluye las moléculas de solvente protegiendo al cromóforo de ser desactivado (*quenching*) por moléculas de agua. Para estudiar una proteína de interés, puede crearse una versión fluorescente de la misma mediante la **fusión génica con una FP**. Con esta nueva proteína, usualmente llamada **quimera** en referencia al monstruo mitológico compuesto por partes de distintos animales, puede monitorearse su localización y dinámica en célula vivas. A diferencia de otras técnicas basadas en afinidad, la fusión génica garantiza la especificidad del marcado. Sin embargo deben realizarse los controles adecuados ya que la funcionalidad de la proteína de interés puede verse afectada.

Mientras que el descubrimiento y utilización como herramienta de las FP produjo una mejora en el contraste de la imagen, la microscopía confocal hizo lo propio con la resolución [11,12]. Por difracción, un microscopio es un filtro pasa bajo en frecuencias espaciales, que reconstruye una fuente puntual en la muestra como una imagen borrosa en el detector. Las dimensiones de esta imagen llamada función de dispersión del punto (PSF por sus siglas en inglés de *Point Spread Function*) son del orden de la longitud de onda de la luz y para un microscopio convencional puede alcanzar un mínimo cercano a los 250 nm de diámetro en la dirección lateral y varios micrones en la dirección axial (colineal a la propagación del haz). Esto es lo que imposibilita la observación de estructuras sub-micrométricas ya que las imágenes de dos puntos vecinos (más cercanos entre sí que la longitud de onda) se fusionan en uno solo (**Fig. 1a**). **La microscopía confocal** utiliza una apertura (*pinhole*) colocada en el plano conjugado de la muestra para rechazar la luz fuera de foco, llevando la resolución axial por debajo del micrómetro. Esto brinda **la capacidad de realizar un seccionamiento óptico de la célula**.

Si bien la microscopía confocal logra reducir el volumen de observación por debajo de 1 μm^3 (1 fL), sus dimensiones son mucho mayores que el tamaño típico de una proteína típica (80 KDa o equivalentemente 10-7 fL para una proteína globular). Esto tiene consecuencias importantes sobre el estudio de interacciones ya que dos proteínas pueden colocalizar (aparecer juntas en una imagen) y sin embargo estar lejos en términos moleculares. En otras palabras, es importante notar que **dos proteínas colocalizan si están interactuando, pero lo opuesto no es necesariamente cierto** ya que depende del volumen de observación [13].

En la última década han tomado impulso diversas técnicas que permiten resolver por debajo del límite de difracción de Abbe llegando rutinariamente a 20 nm. A grandes rasgos, pueden agruparse en dos categorías. En primer lugar se encuentran aquellas **disminuyen el tamaño de la PSF** mediante algún proceso no lineal o de *desexcitación* de la muestra. Por ejemplo, la microscopía de barrido por láser STED (del inglés *STimulated Emission Depletion microscopy*) utiliza un haz infrarrojo con forma de anillo co-lineal al haz de excitación de fluorescencia [14]. Por emisión estimulada, este haz fuerza a las moléculas a caer del estado excitado. De esta forma previene la emisión fluorescente en la periferia resultando en una PSF efectiva de menor tamaño (**Fig. 1b**). Recientemente, se ha utilizado STED para visualizar simultáneamente múltiples proteínas sinápticas en secciones de cerebro de rata y se ha encontrado evidencia que existen diferencias tanto moleculares como estructurales en las vesículas que operan en los nervios presinápticos [15]. También se ha utilizado STED para observar la corteza cerebral de un ratón vivo con una resolución menor que 70 nm [16].

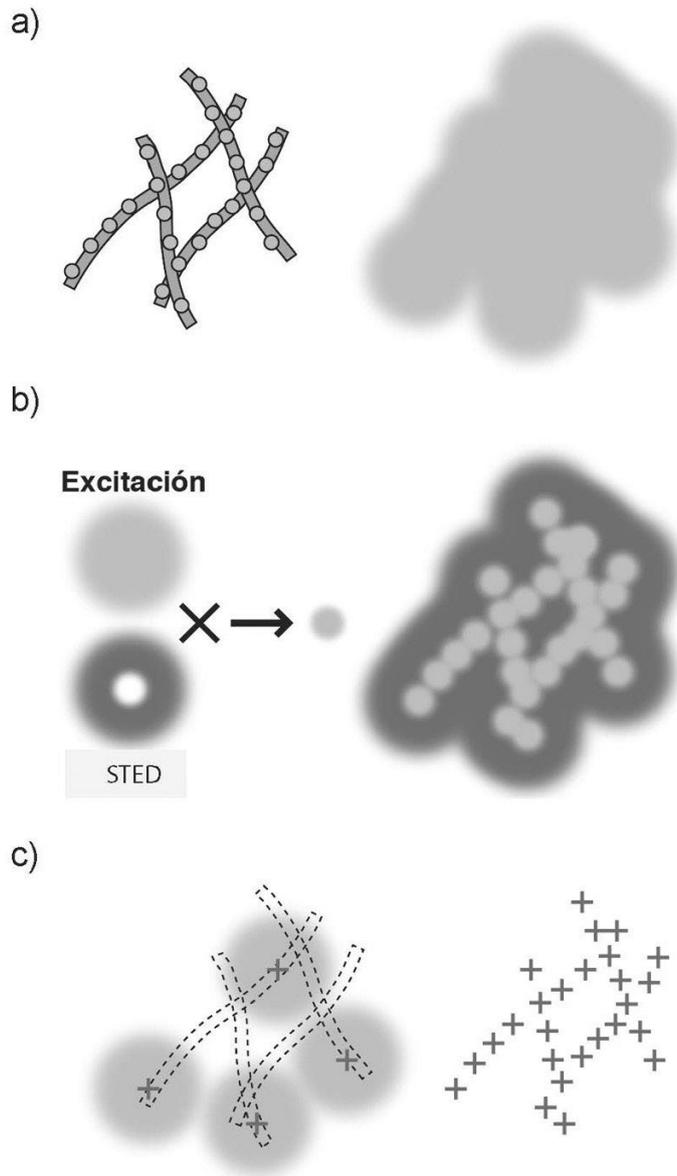


Fig. 1. Comparación de métodos de superresolución. a) En microscopía convencional, cada molécula fluorescente (puntos) aparece en la imagen como un punto más grande por causa de la difracción. No se puede resolver la estructura original. b) En STED, co-lineal al haz de excitación se barre un anillo infrarrojo que fuerza el decaimiento por emisión estimulada. De esta forma se restringe la fluorescencia al centro obteniendo una PSF más fina. c) En los métodos de localización de moléculas individuales se reconstruye la imagen final de una secuencia de capturas donde en cada una de ellas se observa un número pequeño de moléculas (cruces) de forma tal que sus PSF (puntos) estén bien separadas. *Adaptado con permiso de [34]*

En un segundo grupo de técnicas se encuentran aquellas que **localizan fluoróforos individuales** con una precisión que mejora la resolución del microscopio como la inversa de la raíz cuadrada del número de fotones detectados. Por ejemplo, un fluoróforo del que se obtienen 100 fotones puede localizarse con una incerteza de ~ 25 nm. Es importante remarcar que **localizar no es resolver**. Lo primero se refiere a determinar las coordenadas espaciales de una molécula, mientras que lo segundo es la capacidad para distinguir dos moléculas muy cercanas. Estas técnicas resuelven moléculas cercanas mediante la captura de múltiples imágenes. En cada una se realiza una excitación esparza de los fluoróforos y por lo tanto la probabilidad de observar dos cercanos es muy baja.

Las variantes de esta familia difieren en cómo se realiza la excitación esparza (**Fig. 1c**). En PALM (del inglés *Photoactivated localization microscopy* [17]) se utilizan proteínas fluorescente que son activadas mediante un pulso de luz UV. Se activa con pulso calibrado para excitar solo unas pocas moléculas en el campo visual y luego se captura una imagen hasta que se fotodestruyen las moléculas activas. Este proceso se repite hasta que todos los fluoróforos hayan sido activados y observados. Utilizando esta técnica se ha podido cuantificar la distribución interna de proteínas en estructuras submicrométricas como las adhesiones focales [18]. Por otro lado, en STORM (del inglés *Stochastic Optical Reconstruction Microscopy*) se utiliza un marcado con sondas orgánicas cuyo parpadeo (*photoblinking*) se utiliza para distinguir moléculas vecinas [19].

Determinando la movilidad e interacción de proteínas

A pesar de los notables y continuos avances de las técnicas de super-resolución, la determinación de interacciones moleculares, cambios conformacionales y dinámicas rápidas sigue siendo difícil mediante estas técnicas. Por este motivo, se han desarrollado un conjunto de técnicas usualmente denominadas como “**funcionales**” que cuantifican directamente estos observables. El ejemplo más común y uno de los primeros en desarrollarse es FRAP (del inglés *Fluorescence Recovery After Photobleaching*). En esta técnica se fotodestruyen las proteínas fluorescentes en una región de la célula y luego se monitorea la recuperación de la fluorescencia causada por el intercambio con las regiones circundantes [20]. De esta forma pueden inferirse los mecanismos moleculares que controlan la movilidad de las proteínas observadas así como sus escalas temporales. En algunos casos, la fluorescencia no se recupera completamente indicando que existe un fracción de proteína inmovilizada probablemente ancladas directa o indirectamente a estructuras celulares. Existen otras técnicas similares como por ejemplo FLIP (del inglés *Fluorescence Loss In Photobleaching*) donde se fotodestruye repetidamente una región de la células y se monitorea el cambio en la regiones vecinas. Esta técnica provee información acerca de la dinámica en la célula como un todo.

Estos métodos de fácil implementación permiten determinar directamente la movilidad de proteínas sin embargo hay algunas consideraciones a tener en cuenta al inferir parámetros cuantitativos tales como coeficientes de difusión. En primer lugar, es difícil monitorear dinámicas muy rápidas por el tiempo que se tarda en realizar la fotodestrucción. También es complejo cuantificar con precisión dinámicas lentas ya que la síntesis proteica debe ser tenida en cuenta. Más aún, el ajuste de los datos asume un modelo geométrico de la región de interés así como de los mecanismos de movilidad y los valores obtenidos pueden ser fácilmente mal interpretados si los modelos subyacentes son incorrectos [21].

Utilizando proteínas fotoactivables como las mencionadas anteriormente o fotoconvertibles (que cambian de color al ser iluminadas con luz UV) es posible realizar los experimentos de FRAP/FLIP a la inversa: en lugar de monitorear la pérdida de fluoróforos es posible seguir la trayectoria de las moléculas fotoactivadas. Mediante esta técnica (tipo *pulse and chase*) se determinó que durante el desarrollo embrionario de la mosca de la fruta existe una compartimentalización previa a la celularización [22].

Las técnicas mencionadas anteriormente registran la dinámica del *ensemble* de moléculas promediando las fluctuaciones. En un sistema ergódico, la observación en una región del espacio limitada de un número suficientemente grande de eventos es equivalente a observar la distribución estadística de todos los eventos posibles del *ensemble*. **Las fluctuaciones contienen información de los mecanismos fisicoquímicos subyacentes.** Este principio es utilizado en FCS (del inglés *Fluorescence Correlation Spectroscopy*) para

determinar, entre otras propiedades, concentraciones absolutas y coeficientes de difusión [23]. En esta técnica de molécula única, se cuantifica la fluorescencia en función del tiempo en el volumen confocal situado en una región de interés de la célula. A diferencia de otras técnicas de microscopía de fluorescencia, la relación señal ruido no está dada por la intensidad total sino por la amplitud de las fluctuaciones. Por esto es fundamental maximizar el brillo por molécula y reducir su número en el volumen observado de forma tal que el ingreso o egreso de una de ellas produzca una variación significativa de la intensidad [24]. Esto se logra trabajando con volúmenes ($< fL$) y concentraciones pequeñas (nanoMolar).

Las técnicas basadas en fluctuaciones también pueden utilizarse para detectar la interacción de proteínas ya sea de forma directa o indirecta (mediada por otra). En FCCS (del inglés *Fluorescence Cross Correlation Spectroscopy*) cada proteína es marcada con un color diferente. Su interacción resultará en la co-difusión por el volumen confocal y por lo tanto una alta tasa de coincidencias entre ambos colores. Utilizando FCCS se determinó la fracción de cada uno de los complejos en la cascada de MAPK en levadura [25]. Esta variante no es efectiva para cuantificar la formación de homo-oligómeros por la dilución de la señal, pero pueden utilizarse variantes basadas en cuantificar el brillo molecular aparente ya que este depende del estado de agregación [26,27].

Es interesante remarcar un desarrollo reciente denominado pCF (del inglés *pair Correlation Function*) que combina FCS y el seguimiento de partículas individuales. Se basa en medir el tiempo que tarda una dada molécula en transitar de un punto a otro de la célula utilizando métodos de correlación y se utilizó para mostrar el movimiento dirigido de proteínas a través del poro nuclear [28].

Determinar si existe una interacción directa entre dos proteínas o un cambio conformacional requiere sensar distancias (o cambios en distancias) del orden de unos pocos nanómetros. En las técnicas basadas en transferencia de energía resonante de Förster (FRET, por sus siglas en inglés), **una molécula fluorescente** (llamada donante) **transfiere no radiativamente energía a otra** (llamada aceptor) **sólo cuando se encuentran a distancias más cercanas que el radio de Förster R_0** (típicamente < 5 nm para los fluoróforos usados en biología) [29]. Puede utilizarse como donante y aceptor sendas quimeras fluorescentes de las proteínas de interés obtenidas. Sólo cuando las proteínas de interés estén interactuando, se producirá una transferencia de energía que puede detectarse por la reducción en la emisión del donante o por el aumento en la emisión del aceptor (**Fig. 2a**). FRET no mejora la resolución del instrumento pero es capaz de sensar proximidad en escalas relevantes para las interacciones moleculares.

Si bien existen muchas formas de medir FRET en el microscopio una de la más robusta es a través del cambio en el tiempo de vida de fluorescencia donante y se denomina FLIM (del inglés *Fluorescence Lifetime Imaging Microscopy*) [13,30]. Efectivamente, la reducción en la eficiencia cuántica del donante es equivalente a una reducción en su tiempo de vida. Esta medición si bien es técnicamente más sofisticada, permite distinguir FRET de otros procesos (p.ej. reducción del número de moléculas por fotodestrucción) con similar efecto en la emisión de un *ensemble* de moléculas. Se ha utilizado para cuantificar la fracción fosforilada del receptor de crecimiento epidérmico (EGFR, por sus siglas en inglés) con alta resolución espacial (**Fig. 2b**) [31]. También se ha utilizado para determinar la interacción N-RAS y PDE-Delta así como también la acción de una droga que rompe su interacción [32]. Esta técnica permite cuantificar con exactitud y precisión la fracción de proteína en complejo con otra (**Fig. 3b**) [33].

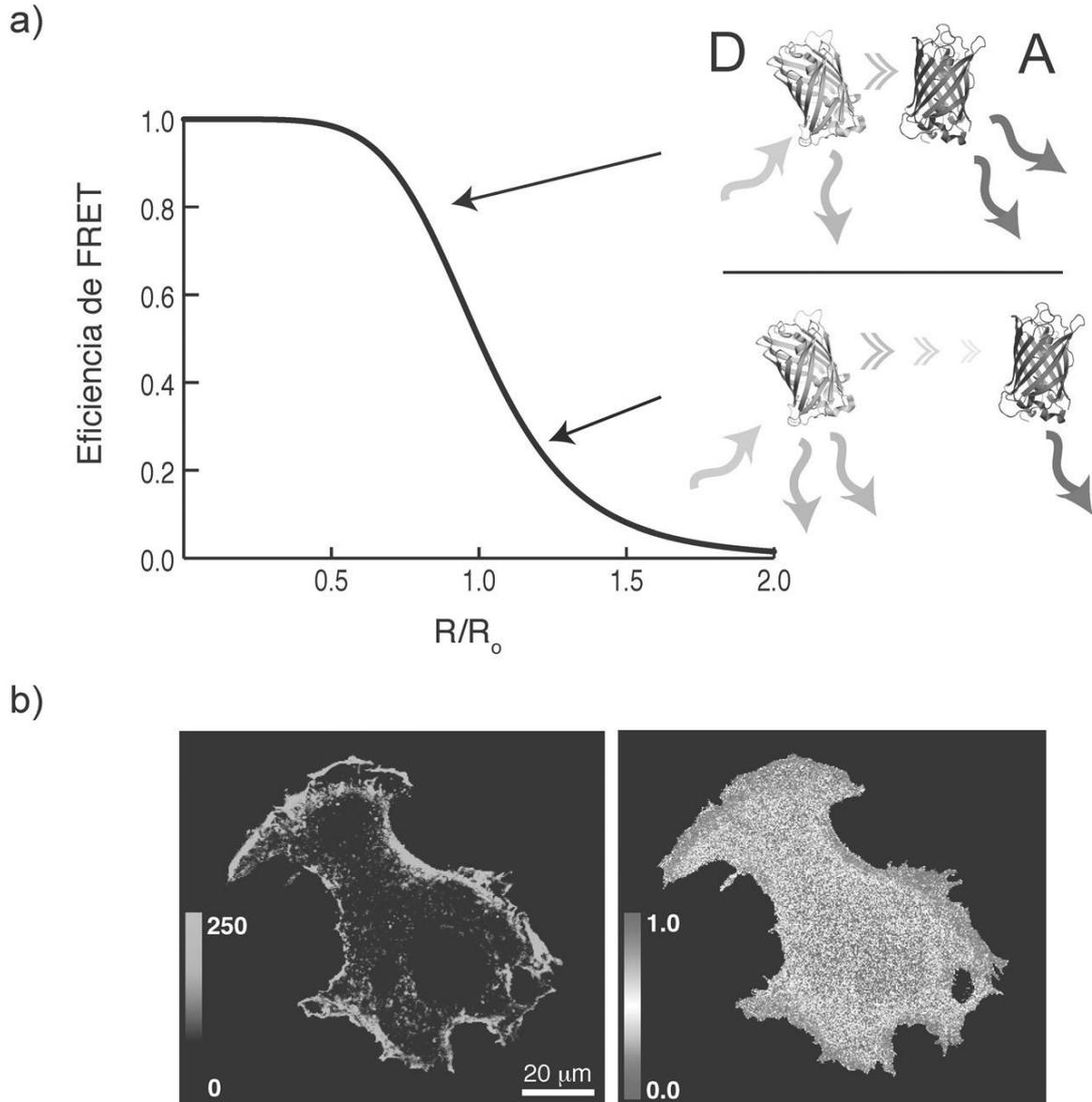


Fig. 2. Transferencia de Energía Resonante de Förster. a) La eficiencia de transferencia disminuye abruptamente en función de la distancia donante (D) – aceptor (A). La escala espacial está determinada por el radio de Förster (R₀) (típicamente ~ 5 nm para los fluoróforos usados en biología). Si la transferencia es eficiente, el donante cede parte de su energía, emite menos (flechas saliendo de D) y el aceptor emite más (flechas saliendo de A) b) **Ejemplo de aplicación de FRET-FLIM** a la determinación fracción de proteína fosforilada. Células MCF-7 son transfectadas con el receptor de crecimiento epidérmico unido a una variante de la proteína fluorescente amarilla (mCitrine). Luego de fijar y permeabilizar, se agrega un anticuerpo anti-fosfotirosina marcado con Cy3.5, un buen aceptor para mCitrine. (izq) Localización del receptor (der) Fracción de receptor fosforilado. *Adaptado con permiso de [30]*

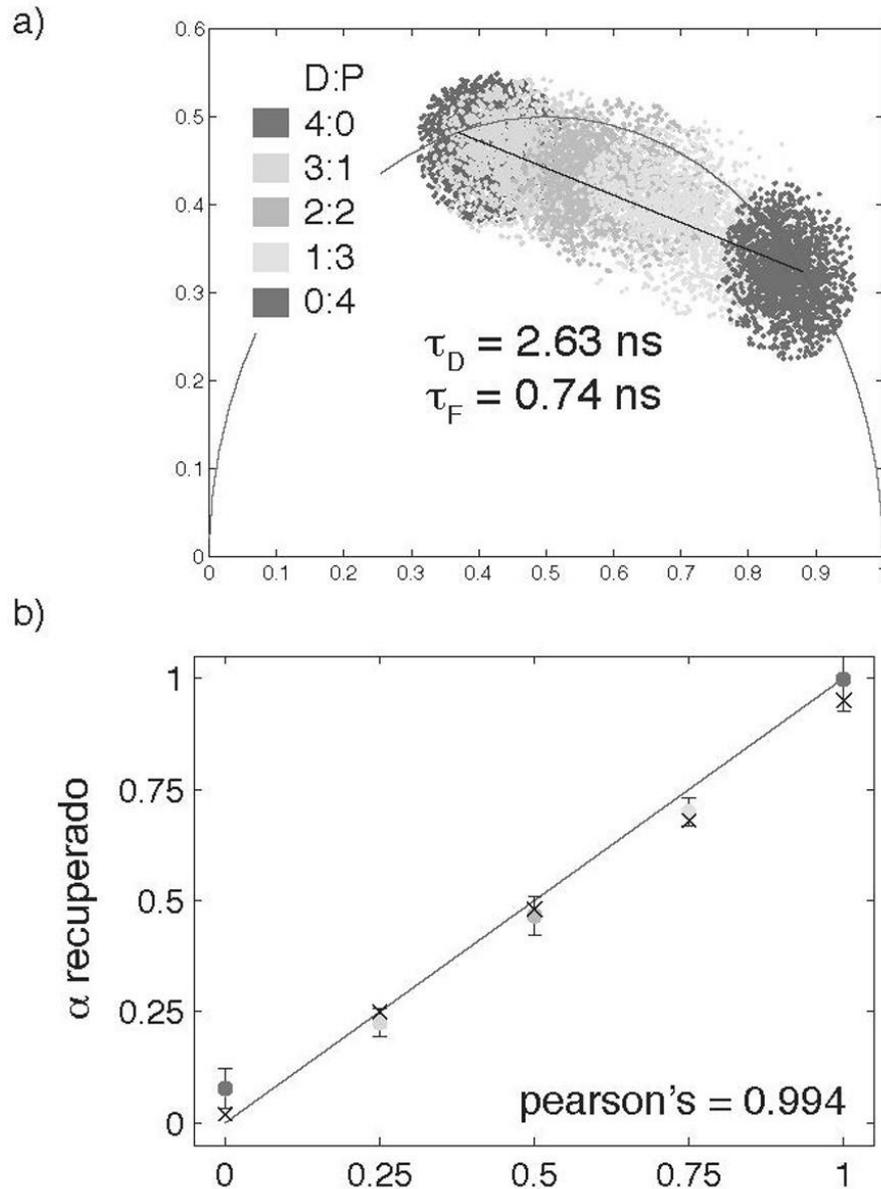


Fig. 3. Exactitud y precisión del ensayo de FRET-FLIM. Para validar el ensayo, se sintetizó *in vitro* un sustrato fosforilado y otro desfosforilado unidos a una variante de la proteína fluorescente amarilla (mCitrine). Se los mezcló en diferentes proporciones estequiométricas y se agregó anticuerpo anti-fosfotirosina marcado con Cy3.5, un buen aceptor para mCitrine. **a)** Análisis en el plano complejo de las diferentes muestras. De izquierda a derecha aumenta la fracción fosforilada en la muestra. Como se espera, las mezclas intermedias aparecen en la línea que une ambos puntos. La fracción de proteína fosforilada en cada medición puede obtenerse su la proyección sobre esta recta. **b)** Valores medios recuperados con FRET-FLIM (eje y) en función del valor esperado (eje x). Superpuesto se observa la recta de pendiente 1. El coeficiente de correlación cercano a la unidad muestra la calidad del método.

Adaptado con permiso de [32]

Conclusión

La célula es un organismo complejo, en constante movimiento. De forma similar a los atlas del cuerpo humano que con diferentes transparencias superponen los diversos sistemas que lo componen, cada técnica de microscopía revela distintos aspectos del funcionamiento celular. Entender la regulación requiere una batería de métodos capaz de obtener una versión integral (sistémica) del funcionamiento. En este trabajo hemos

mencionado sólo algunos de los métodos disponibles, pero la microscopía para biología es un campo en constante desarrollo motivado por medir lo que hoy no es medible.

Sin embargo, a pesar de los avances mencionados en este trabajo, el desafío sigue siendo (1) discernir cuáles de esas componentes e interacciones definen esencialmente al sistema, (2) desarrollar métodos para medirlos (3) generar modelos con capacidad predictiva a partir de esos datos. Avanzar en estos tres aspectos requiere un abordaje interdisciplinario más allá de la mera yuxtaposición de las soluciones de cada disciplina específica. Avanzar en el entendimiento de sistemas complejos requiere, como decía Rolando García, comenzar por una formulación conjunta del problema, realizando nuevas preguntas a viejos problemas (y a nuevos también) [34].

Referencias

- [1] D. Noble, *The music of life: Biology Beyond Genes*, Oxford University Press, Oxford, 2006.
- [2] J.D. Scott & T. Pawson. *Science* **326**, 1220 (2009).
- [3] S. Sarkar, Ecology, en *The Stanford Encyclopedia of Philosophy*, E. N. Zalta (Ed.), Standford, 2014.
- [4] H.E. Grecco, M. Schmick & P.I.H. Bastiaens. *Cell* **144**, 897 (2011).
- [5] G. Griffiths. *Nat. Rev. Mol. Cell Biol.* **8**, 1018 (2007).
- [6] A. Kinkhabwala & P.I.H. Bastiaens, *Curr. Opin. Genet. Dev.* **20**, 31 (2010).
- [7] B.N. Kholodenko, *Nat. Rev. Mol. Cell Biol.* **7**, 165 (2006).
- [8] O. Shimomura, F. Johnson & Y. Saiga, *J. Cell Comp. Physiol.* **59**, 223 (1962).
- [9] D. Prasher, V. Eckenrode, W. Ward, F. Prendergast & M. Cormier, *Gene* **111**, 229 (1992).
- [10] M. Chalfie, Y. Tu, G. Euskirchen, W. Ward & D. Prasher, *Science* **263**, 802 (1994).
- [11] M. Minsky, *Scanning* **10**, 128 (1988).
- [12] J.G. White & W. B. Amos, *Nature* **328**, 183 (1987).
- [13] H.E. Grecco & P.I.H. Bastiaens, en *Live Cell Imaging: A Laboratory Manual*, 2nd. Edit., Cap. 6, R. D. Goldman, J. R. Swedlow & D. L. Spector (Eds.), CSHL Press, Woodbury, 2010.
- [14] S.W. Hell & J. Wichmann, *Optics Lett.* **19**, 780 (1994).
- [15] C. Kempf, T. Staudt, P. Bingen, H. Horstmann, J. Engelhardt, S.W. Hell & T. Kuner, *PLoS One* **8**, 62893 (2013).
- [16] S. Berning, K.I. Willig, H. Steffens, P. Dibaj & S.W. Hell, *Science* **2012**, 335 (2013).
- [17] E. Betzig, G. H. Patterson, R. Sougrat, O. W. Lindwasser, S. Olenych, J. S. Bonifacino, M. W. Davidson, J. Lippincott-Schwartz & H. F. Hess, *Science* **313**, 1642 (2006).
- [18] P. Kanchanawong, G. Shtengel, A.M. Pasapera, E.B. Ramko, M.W. Davidson, H.F. Hess & C.M. Waterman, *Nature* **468**, 580 (2010).
- [19] M. J. Rust, M. Bates & X. Zhuang, *Nature Meth.* **3**, 793 (2006).
- [20] D. Axelrod, D.E. Koppel, J. Schlessinger, E. Elson & W.W. Webb, *Biophys. J.* **16**, 1055 (1976).
- [21] F. Mueller, D. Mazza, T.J. Stasevich & J.G. McNally, *Curr. Op. in Cell Biol.* **22**, 403 (2010).
- [22] M. Mavrikakis, R. Rikhy & J. Lippincott-Schwartz, *Dev. Cell.* **16** (2009).
- [23] D. Madge, E.L. Elson & W.W. Web. *Biopolymers* **13**, 29 (1974).
- [24] S.A. Kim, K.G. Heinze & P. Schwill. *Nature. Meth.* **4**, 963 (2007).
- [25] C.I. Maeder, M.A. Hink, A. Kinkhabwala, R. Mayr, P.I.H. Bastiaens & M. Knop, *Nature Cell Biol.* **9**, 1319 (2007).
- [26] Y. Chen, J.D. Müller, P.T. So & E. Gratton, *Biophys. J.* **77**, 533 (1999).
- [27] J.D. Müller, *Biophys. J.* **86**, 3981 (2004).
- [28] F. Cardarelli, L. Lanzano & E. Gratton. *PNAS* **109**, 9863 (2012).

- [29] T. Förster, *Ann. Phys.* **2**, 55 (1948).
- [29] E.A. Jares-Erijman & T.M. Jovin. *Nature Biotechnol.* **21**, 1387 (2003).
- [30] H.E. Grecco, P. Roda-Navarro & P.J. Vermeer, *Optics Express* **17** (2009).
- [31] A. Chandra, H.E. Grecco, V. Pisupati, D. Perera, L. Cassidy, F. Skoulidi, S.A. Ismail, C. Hedberg, M. Hanzal-Bayer, A.R. Venkitaraman, A. Wittinghofer & P.I.H. Bastiaens, *Nature Cell Biol.* **14**, 148 (2011).
- [32] H.E. Grecco, P. Roda-Navarro, A. Girod, J. Hou, T. Frahm, D.C. Truxius, R. Pepperkok, A. Squire & P.I.H. Bastiaens, *Nature Meth* **7**, 467 (2010).
- [33] R. Garcia, *Sistemas Complejos*, Editorial Gedisa, Buenos Aires, 2007.
- [34] H.E. Grecco & P.J. Vermeer, *ChemPhysChem* **12**, 484 (2011).

Manuscrito recibido el 21 de abril de 2014.

Aceptado el 25 de abril de 2014.

IV

COMUNICACIONES DE ACADÉMICOS

HALCONES EN EL TENIS Y EN EL FÚTBOL

Horacio C. Reggini

Académico Titular de la Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales
Académico Titular de la Academia Nacional de Educación
Académico Titular de la Academia Argentina de Letras
Académico Titular de la Academia Argentina de Artes y Ciencias de la Comunicación
Académico Titular de la Academia del Mar

Resumen

Este trabajo es una continuación de un primer trabajo “La enseñanza de la Ingeniería en el siglo XXI” sobre los sistemas procognitivos vislumbrados en el siglo XX por R. Buckminster Fuller y J. C. Lickliger, aplicados a los procesos de interacción, generación, organización y empleo del conocimiento que han revolucionado la práctica de la ingeniería. También de un segundo trabajo “Educación del ingeniero en un mundo cambiante. El aprendizaje y la enseñanza de la Ingeniería en el siglo XXI”, en el que cito principal y extensamente, como ejemplos de la interacción de la ciencia y de la tecnología con la sociedad y la gente, la fabricación y el uso de las lapiceras Birome y las afeitadoras Gillette. En este tercer trabajo, siguiendo un criterio similar, apunto a la utilización de sistemas de computación y de telecomunicaciones aplicados al control de partidos de tenis y de fútbol.

Palabras clave: Ingeniería; Educación.

Abstract

Falcons in Tennis and Football. This paper is a continuation of a first one “Teaching engineering in the twenty-first century” about the procognitive systems imagined by R. Buckminster Fuller and J. C. Lickliger, applied to the processes of interaction, generation, organization and use of knowledge, which have changed the practice of engineering. Also of a second one, “Education of the engineer in a changing world. Learning and Teaching Engineering in the twenty-first century”, that main and widely mentions, as examples of the interaction of science and technology with society and people, the production and use of Birome pens and Gillette shaving machines. In this third paper, following a similar criterion, I point out the use of computer and telecommunication systems to the control of tennis and football games.

Key words: Engineering; Education.

Introducción

Se están utilizando cada vez más en los campeonatos deportivos importantes del mundo técnicas de computadoras y de telecomunicaciones para controlar el cumplimiento estricto de los respectivos reglamentos en vigencia. Así, por ejemplo en el tenis, el denominado sistema “Ojo de Halcón” se aplica para detectar si una pelota picó dentro o fuera de la cancha. Para estar afuera, lo debe estar en su totalidad: ningún punto debe estar en la línea correspondiente de límite. Para el caso del fútbol, se aplica para detectar si la pelota ha entrado o no en los límites dados por el arco, definido por los parantes y el travesaño. En ambos casos, el sistema se basa en el análisis tridimensional de las imágenes de cámaras de alta velocidad ubicadas convenientemente.

Cómo funciona el Ojo de Halcón en el tenis

El Ojo de Halcón (Hawk-Eye) es un sistema informático usado en tenis y otros deportes para seguir la trayectoria de la bola en juego. El sistema informático genera una imagen de la trayectoria de la pelota que puede ser utilizado por los jueces para decidir en jugadas dudosas. Fue desarrollado en Hampshire, Reino Unido en 2001 por ingenieros trabajando en la empresa Roke Manor Research Limited. La patente es propiedad del Dr Paul Hawkins y David Sherry. Más adelante, la tecnología se continuó en una compañía separada, Hawk-Eye Innovations Ltd.

En el Abierto de los Estados Unidos de 2004 fueron muchas las bolas cantadas erróneamente. En la derrota polémica de cuartos de final de Serena Williams contra Jennifer Capriati, muchas bolas cruciales fueron protestadas por Williams, y las repeticiones de televisión demostraron que en la mayoría de los casos tenía razón en quejarse.

En otoño de 2005 el Hawk-Eye fue probado por la Federación Internacional de Tenis (ITF, por sus siglas en inglés) en Nueva York y pasó a uso profesional. Hawk-Eye informó que las pruebas de Nueva York se basaron en 80 tiros medidos por una cámara fotográfica de alta velocidad del ITF, un dispositivo similar a la MacCAM. Estas pruebas fueron cuestionadas posteriormente pues una sola cámara fotográfica de alta velocidad tendría hasta una pulgada de “puntos ocultos” y no puede medir con exactitud a nivel de milímetro. Los sistemas basados en vídeo son también sensibles al calor y otras condiciones ambientales con lo que una prueba de un solo día no podría revelar tales marcas. Asimismo, el sistema de Hawk-Eye ha demostrado desde entonces producir resultados erróneos en varios torneos, por ejemplo en Dubai o en el Abierto de Australia. Solo existieron al comienzo tres sistemas Ojos de Halcón oficiales, los cuales se trasladaban de torneo a torneo, según la importancia de éstos.

El Hawk-Eye ha cubierto en televisión varios torneos importantes del tenis, como el de Wimbledon, el Stella Artois, el Abierto de Australia, la Copa Davis y la Tennis Masters Cup. El Abierto de los Estados Unidos anunció que haría uso oficial de la tecnología para el Abierto de los Estados Unidos 2006. También se utilizó como parte de una simulación más grande del tenis puesta en acción por IBM llamado PointTracker. Junto con el sistema Cyclops y el sistema Auto-Ref fueron algunos de los varios mecanismos automatizados utilizados. En marzo de 2006, en el Abierto de Nasdaq-100, el Ojo de Halcón fue utilizado oficialmente por primera vez en un acontecimiento tenístico. En 2006, el Abierto de los Estados Unidos se convirtió en el primer acontecimiento que utilizó el sistema durante el juego, permitiendo que los jugadores desafiaran al juez de línea.

En 2006 en la Copa Hopman de Perth, Australia, fue el primer torneo del tenis de élite donde se permitió a los jugadores pedir un “challenge” (desafío), que entonces fueron repasados por los árbitros que usaban tecnología del Ojo de Halcón. Se utilizaron 10 cámaras fotográficas que proporcionaban la información sobre la posición de la bola a las computadoras. En el Abierto de Australia 2007, se usó por primera vez en un Grand Slam el sistema Ojo de Halcón con la posibilidad de pedir el “challenge” en puntos dudosos. Cada jugador de tenis en el Rod Laver Arena, dispuso de hasta dos “challenges” incorrectos por set y uno adicional en caso de tiebreak. En el caso de un set de desempate final, los “challenges” se reajustaban a dos para cada jugador cada doce juegos. Se produjeron entonces algunas controversias, ya que el Ojo de Halcón indicó algunos errores.

Funcionamiento

El sistema Ojo de Halcón se basa en la triangulación de imágenes obtenidas por cámaras de alta velocidad las cuales son colocadas en puntos adecuados alrededor de la cancha de tenis. Todas estas imágenes son procesadas a muy alta velocidad y con esto se reconoce la pelota de tenis y se calcula su trayectoria. Puede reconocer la trayectoria de la pelota con solamente dos imágenes de cada cámara al mismo tiempo ya que se vale de principios físicos para calcular la distancia que viajará y el bote de la pelota. Para que esto funcione se necesita obviamente un modelo del terreno, la posición exacta de las cámaras y el lugar hacia donde enfocan.

Con todos estos datos el sistema genera una animación gráfica de la trayectoria de la pelota y el bote sobre el terreno con lo que en cuestión de segundos se puede repetir una jugada mostrándola en una pantalla visible para todos. Este sistema es muy rápido por lo que no se pierde tiempo en las revisiones de jugadas.

Características del sistema Ojo de Halcón

- Se rodea la cancha con tele-cámaras que son ubicadas en los ángulos del estadio y que están conectadas a un sistema operativo central.
- Las imágenes captadas son elaboradas por la computadora central y se reproducen luego gráficamente determinando la trayectoria y lugar exacto de pique de la pelota.
- Esta tecnología ofrece la posibilidad de juzgar correctamente el destino de una pelota.
- Esto libera al juez de estar constantemente pendiente de este tipo de jugadas y le permite estar más atento a las demás situaciones del partido.
- Esto busca eliminar las discusiones e influencias que los árbitros reciben de los jugadores. También se eliminarán las tan discutidas compensaciones que suelen aparecer cuando un árbitro da cuenta de un error cometido.
- El jugador tendrá un número determinado con anterioridad para hacer uso del pedido de repetición de una jugada dudosa. Esta regla se aplicará con el fin de que las partidas no sean cortadas sucesivamente y el juego pierda dinamismo.

Cómo funciona el Ojo de Halcón en el fútbol

El reglamento del fútbol establece que la línea de gol debe ser sobrepasada íntegramente por la pelota para que se considere gol. Un sistema parecido al Ojo de Halcón del tenis ha sido implementado para el fútbol.

El reglamento actual de la FIFA (3) establece la denominada “área de meta” –o área de gol- de la manera siguiente:

“Se trazarán dos líneas perpendiculares a la línea de meta, a 5.5 m de la parte interior de cada poste de meta. Dichas líneas se adentrarán 5.5 m en el terreno de juego y se unirán con una línea paralela a la línea de meta. El área delimitada por dichas líneas y la línea de meta será el área de meta.”

La FIFA viene analizando la utilización del sistema Ojo de Halcón para resolver los goles fantasmas en los partidos de fútbol. O sea, el uso de recursos electrónicos para resolver dudas sobre si una pelota entra o no entra en el arco. Esta situación se hizo crítica cuando, en la final de la Copa de las Confederaciones, una pelota del jugador brasileño Kaká se puso en

duda, si había entrado o no, al arco del equipo de los Estados Unidos. El arquero norteamericano Tim Howard rechazó la pelota cuando aparentemente la pelota había traspasado la línea del arco de su equipo, pero el árbitro del partido, el sueco Martin Hansson no dio el gol.

El presidente de la FIFA, Joseph Blatter, informó a los pocos días, que, exclusivamente para las dudas que se generan en la línea de gol, se realizaban pruebas de incorporación de medios electrónicos para al arbitraje de partidos de fútbol. Preguntado si no se podía desarrollar una tecnología similar a la del tenis con el sistema Ojo de Halcón, Blatter indicó que la principal dificultad es que la bola de tenis se analiza en una sola dimensión y la fútbol en tres. “Se probó el sistema Ojo de Halcón en la segunda división inglesa y a pesar del uso de siete cámaras, las conclusiones no fueron seguras. No se podía detectar si la pelota había o no entrado completamente en el arco”, indicó Blatter, quien también dijo que la introducción de un chip dentro de la pelota tampoco era una garantía. “Siempre habrá errores, pero tenemos que dejar que el fútbol tenga errores porque es un juego humano”, agregó Blatter, quien también recordó que hace cinco años la International Board de la FIFA admitió el estudio de introducir la tecnología para decidir en jugadas en la que el gol fuese dudoso. Además, recordó que en un torneo celebrado en Japón se probó el chip en el balón, pero se dio la circunstancia de que no hubo ninguna jugada conflictiva como la del gol de Kaká en la final de la Copa de las Confederaciones. Además, anunció que en una próxima edición de la Liga Europea, antes la Copa de la UEFA, se emplearían dos árbitros para atender ese tipo de jugadas conflictivas, y que a principios de 2010 recibirían en la FIFA un nuevo informe sobre la utilización del chip dentro del balón por parte de la empresa que estudia ese procedimiento. “Sólo hablamos de la línea de gol, no de toda el área, ni de ver repeticiones por televisión, ni de utilizar la cámara lenta. Queremos mantener la cara humana del fútbol”, concluyó el máximo dirigente de la FIFA.

Cabría señalar, por otra parte, que lo que está llamándose actualmente deporte, dista mucho de la idea inicial de que “hacer algo por deporte” fuera una idea altruista, ya que se ha convertido en un negocio más, y que somete además a las masas a pasiones que las distraen de los temas sociales principales. Es el “*pane et circensis*” que mantenía entretenidos a los esclavos romanos.

También sirve para propagar la idea de la competitividad a ultranza (uno gana y los demás pierden) y dejar como inservible la idea de cooperación y de apoyo mutuo con el que se fomenta las relaciones más humanas entre humanos.

Los espectadores realmente no necesitan ni demandan tanta precisión y se les quita uno de los temas divertidos de discusión para la semana. ¿Qué sucedería si se diseñasen botines de fútbol o raquetas de tenis que calculasen trayectorias correctas para las respectivas pelotas que lancen?. Quizás habría que preocuparse más acerca de la gente y no tanto por las precisiones tecnológicas.

Pelotas de fútbol

Una realización exitosa de R. Buckminster Fuller (1895-1983) fue la introducción en los campeonatos internacionales de fútbol de una pelota formada por 12 paneles pentagonales y 20 paneles hexagonales: un icosaedro truncado, esencialmente, una Geodesic Sphere, según su nomenclatura.

Este diseño de 32 partes de cuero cosidas entre sí, aprobado por la FIFA (Fédération Internationale de Football Association), se utilizó en la 1970 World Cup de

México, con el nombre Telstar, en homenaje al satélite que hizo posible la transmisión de la copa a diversos rincones del orbe. Esa pelota se utilizó durante varios años, variando colores y dibujos, hasta que fue reemplazada por otra, llamada Teamgeist, en la 2006 World Cup, jugada en Alemania, compuesta por 14 paneles, de material sintético, unidos por termosoldadura.

Charles Goodyear (1800-1860) fabricó la primera pelota de fútbol de cuero vulcanizada.

Las primeras pelotas de cuero se hicieron de pedazos de cuero unidos entre sí por cordones; posteriormente, se hicieron de piezas de plástico obtenidas en moldes esféricos para asegurar la redondez perfecta de la pelota. La empresa Adidas ha sido la fabricante de las pelotas oficiales de todas las copas desde 1970. De continuo se ha intentado realizarla con los más modernos saberes para lograr las condiciones más favorables de peso, maniobrabilidad, absorción de energía, seguridad para poder cabecearlas, y la aceptación general por parte de los jugadores y del público. Todos estos problemas son ejemplos importantes de la interacción de la ciencia y de la tecnología con la sociedad. La última pelota de la 2010 FIFA World Cup Official Match fue la Jabulani, utilizada en Sudáfrica, que lamentablemente despertó diversas críticas, ya que se dijo que tenía imprecisiones en su trayectoria.

El próximo diseño de la pelota de fútbol, será la llamada “Brazuca”, para la 2014 FIFA World Cup a jugarse este año en Brasil, y todos esperamos que sea una de las cumbres de la tecnología del siglo XXI.

La Brazuca

La **Brazuca** es la pelota de fútbol oficial para la Copa Mundial de Fútbol de 2014. La pelota, fabricada por Adidas y fue presentada el 03/12/13, y obtuvo su nombre el 2 de septiembre de 2012, cuando concluyó una votación en la que participaron un millón de hinchas del país anfitrión. La pelota trae una nueva configuración de paneles, coloridos detalles basados en el logo del evento y un diseño con la constelación de estrellas presentes en la bandera brasileña.

La pelota Brazuca debió superar las pruebas más exigentes durante más de dos años y medio, y en ellas tomaron parte más de 600 de los mejores jugadores de todo el mundo y 30 equipos de más de 10 países a lo largo y ancho de tres continentes distintos. Así es como se convirtió en la pelota que más pruebas ha debido superar de toda la historia de Adidas, para garantizar su adaptabilidad a cualquier terreno de juego. Los equipos de fútbol que han participado en dichas pruebas son, entre otros, el AC Milan, el Bayern München, el Palmeiras y el Fluminense. Algunos de los jugadores involucrados durante el proceso han sido las estrellas de fútbol Lionel Messi, Iker Casillas, Bastian Schweinsteiger y Zinedine Zidane.

Esta pelota ya ha salido al campo de juego en varios encuentros de carácter internacional durante la competición de la Copa Mundial sub-20 de la FIFA, y en un partido amistoso entre Suecia y Argentina en febrero del 2013.

Referencias

- <http://www.hawkeyeinnovations.co.uk/>
- <http://en.wikipedia.org/wiki/Hawk-Eye>
International Tennis Federation (ITF), New York

- <http://www.taringa.net/posts/deportes/12537417/Como-funciona-el-Ojo-de-Halcon-en-el-tenis.html>
- <http://www.taringa.net/posts/deportes/2841476/Fifa-Ojo-de-Halcon-para-el-futbol.html>
- Fédération Internationale de Football Association (FIFA), Zurich
http://es.fifa.com/mm/document/footballdevelopment/refereeing/81/42/36/log2013es_spanish.pdf<http://www.taringa.net/posts/deportes/2841476/Fifa-Ojo-de-Halcon-para-el-futbol.html>
- H.C. Reggini, “*La enseñanza de la ingeniería en el siglo XXI. Teaching engineering in the twenty-first century*”, Buenos Aires : Ed. Galápagos, 2013. Capítulo *Formas espaciales*, pág. 43.
- http://www.eltiempo.com/deportes/futbol/balon-oficial-del-mundial-brazuca_13248824-4
- H.C. Reggini, “Educación del Ingeniero en un Mundo Cambiante. El Aprendizaje y la Enseñanza de la Ingeniería en el Siglo XXI” en: *La Educación del Ingeniero para un Mundo Cambiante* (L.A. de Vedia, Ed.), Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, Buenos Aires, 2014.

Manuscrito recibido el 10 de febrero de 2014.

Aceptado el 22 de abril de 2014.

V

ENSAYOS DE BECARIOS

ENSAYOS DE BECARIOS

1. Becas “*In Libris Carpe Rosam*”

Por donación de Marcelo G. y Paulo D. Barroso Mastronardi desde 1999 esta Academia ofrece las becas “*In Libris Carpe Rosam*” en Matemática y Ciencias Biológicas, respectivamente. Estas becas están destinadas a estudiantes de la Universidad de Buenos Aires, menores de 22 años de edad, y con dedicación exclusiva a las dos áreas mencionadas.

Los beneficiarios de estas becas deben informar a la Academia acerca del avance de sus estudios y al finalizar la misma deben presentar un breve ensayo que refleje sus ideas y opiniones acerca de un acontecimiento nacional o internacional ocurrido en el lapso de la beca, que implique el cercenamiento de derechos humanos, discriminación de cualquier tipo, o que ponga trabas al progreso del conocimiento.

Estos ensayos pueden leerse en la página web de la Academia (www.ancefn.org.ar), entrando en el apartado de Becas y luego en la sección Becas “*In Libris Carpe Rosam*”. A continuación se detallan los ensayos que han sido presentados por los beneficiarios de las convocatorias 2011-2013, y que se encuentran disponibles en la página mencionada:

2011

- Matías Saucedo: “*Reflexiones sobre el concepto de justicia*”
- Daniel Kohen: “*Los reclamos estudiantiles en Cuba*”
- Maria Lovaglio Diez: “*Control del crecimiento poblacional*”

2013

- Romina M. Zambrano Montaña: “*Consecuencias de una Educación frágil y desigual*”
- Laura del C. Fernández: “*Desnutrición infantil*”
- Joaquín M. Pellegrini: “*Conectando Ciencia con Derechos Humanos*”

2. Becas “*Eduardo Gros*”

Por donación de la familia del Dr. Eduardo G. Gros, ex-Presidente de esta Academia, la ANCEFN ofrece las becas “*Eduardo G. Gros*” destinadas a estudiantes que cursen la Licenciatura en Química en cualquier Universidad Nacional, menores de 22 años al iniciar la misma.

Los beneficiarios de estas becas deben informar semestralmente a la Academia acerca del avance de sus estudios y también ellos al finalizar la misma deben presentar un breve ensayo que refleje sus ideas y opiniones acerca de un acontecimiento nacional o internacional ocurrido en el lapso de la beca, que implique el cercenamiento de derechos humanos, discriminación de cualquier tipo, o que ponga trabas al progreso del conocimiento.

Estos ensayos pueden leerse en la página web de la Academia (www.ancefn.org.ar), entrando en el apartado de Becas y luego en la sección Becas “*Eduardo Gros*”.

A continuación se detallan los ensayos que han sido presentados por los beneficiarios de las convocatorias a partir del año 2011, y que se encuentran disponibles en la página mencionada:

- Yair Ezequiel Litman (2011-2013): “*¿Qué hiciste en lo que va del día?*” (I y II)
- María Dolores Morales (2011-cont.):

- a) “*Combatir la discriminación a través de la educación*”
- b) “*Importancia del binomio Ciencia-Tecnología*”



ACADEMIA NACIONAL DE CIENCIAS EXACTAS, FÍSICAS Y NATURALES

Autoridades

Académicos Titulares

Académicos Honorarios

Académicos Eméritos

Académicos Correspondientes en el Exterior

Académicos Correspondientes Nacionales

Secciones

Comisiones

Administración

AUTORIDADES
Ejercicio 2012 – 2014

Presidente
Dr. ROBERTO L. O. CIGNOLI

Vicepresidente
Dr. ARMANDO J. PARODI

Secretario General
Dr. ENRIQUE J. BARAN

Secretario de Actas
Dra. MARIANA D. WEISSMANN

Tesorero
Dr. VÍCTOR J. YOHAI

Protesorero
Ing. LUIS A. DE VEDIA

Suplentes
Dr. JORGE V. CRISCI
Dra. MARTA ROSEN

ACADÉMICOS TITULARES

*Fecha de
Nombramiento*

1. Ingeniero ARTURO J. BIGNOLI	19-06-1965
2. Doctor MARIO A. J. MARISCOTTI	25-04-1986
3. Ingeniero HORACIO C. REGGINI	28-08-1987
4. Doctor ALBERTO PIGNOTTI	27-05-1988
5. Doctor RODOLFO R. BRENNER	24-06-1988
6. Doctor HUNER FANCHIOTTI	28-06-1991
7. Doctor NORBERTO A. FAVA	29-11-1991
8. Doctor Ingeniero RAÚL A. LOPARDO	24-11-1995
9. Doctora MARIANA D. WEISSMANN	31-05-1996
10. Doctor ENRIQUE J. BARAN	31-05-1996
11. Doctor EDUARDO H. CHARREAU	31-05-1996
12. Doctor Ingeniero EDUARDO N. DVORKIN	31-05-1996
13. Doctor ROBERTO L. O. CIGNOLI	24-04-1998
14. Ingeniero EDUARDO NUÑEZ	28-08-1998
15. Doctor VÍCTOR J. YOHAI	29-10-1999
16. Doctor JORGE V. CRISCI*)	27-07-2001
17. Doctor ROBERTO P. J. PERAZZO	25-04-2003
18. Doctor ARMANDO J. PARODI	25-07-2003
19. Doctora NORMA E. SBARBATI de NUDELMAN	25-06-2004
20. Doctor JORGE E. SOLOMIN	24-06-2005
21. Doctor GUSTAVO CORACH	29-07-2005
22. Doctor ALFREDO CALVELO	01-06-2007
23. Doctor CARLOS WASHINGTON RAPELA	01-06-2007
24. Doctor RICARDO GUILLERMO DURAN	31-08-2007
25. Doctor HÉCTOR VUCETICH	26-10-2007
26. Doctora MARTA ROSEN	25-04-2008
27. Doctor Roberto J. FERNÁNDEZ PRINI	27-06-2008
28. Doctor FRANCISCO DE LA CRUZ	24-10-2008
29. Doctor ROBERTO J.J. WILLIAMS	27-03-2009
30. Ingeniero LUIS DE VEDIA	29-05-2009
31. Doctora ZULMA N. BRANDONI de GASPARINI	29-06-2012
32. Doctor FERNANDO ZULOAGA	27-09-2013
33. Doctor Ingeniero RICARDO S. SÁNCHEZ-PEÑA	25-10-2013
34. Doctor MIGUEL A. LABORDE	25-10-2013
35. Doctor VICTOR A. RAMOS	29-11-2013
36. Doctor ALBERTO KORNBLIHTT	29-11-2013

**) Renunció el 14 de agosto de 2013.*

ACADÉMICOS HONORARIOS

Doctor **Daniel R. Bes** (La Lucila, Buenos Aires), Doctor **Mario Bunge** (Montreal, Canadá), Doctor **James W. Cronin** (Chicago, Illinois, Estados Unidos), Doctor **Richard Ernst** (Winterthur, Suiza), Doctor **Leon M. Lederman** (Batavia, Estados Unidos), Doctor **Yuan Tseh Lee** (Taipei, Taiwan), Doctor **Pierre Louis Lions** (París, Francia), Doctor **Chintamani N.R. Rao** (Bangalore, India), Doctor **Frederick Sanger** (Cambridge, Inglaterra),

ACADÉMICOS EMÉRITOS

Doctor **Alejandro J. Arvía** (La Plata, Buenos Aires), Doctor **Horacio H. Camacho** (Ciudad Autónoma de Buenos Aires), Ingeniero **Luis F. Rocha** (Ciudad Autónoma de Buenos Aires).

ACADÉMICOS CORRESPONDIENTES EN EL EXTERIOR

Doctor **Miguel Angel Alario y Franco** (Madrid, España) Doctor **Petar Alaupovic** (Oklahoma City, Oklahoma, Estados Unidos), Doctor **Jorge E. Allende** (Santiago, Chile), Doctor **Daniel Amati** (Trieste, Italia), Doctor **Eduardo J. Ansaldo** (Saskatoon, Saskatchewan, Canadá), Doctor **Agustín Arévalo Medina** (La Laguna, España), Doctor **Francisco E. Baralle** (Trieste, Italia), Doctor **Allen J. Bard** (Austin, Texas, Estados Unidos), Doctor **Klaus-Jürgen Bathe** (Cambridge, Massachusetts, Estados Unidos), Doctor **José Bernabéu Alberola** (Burjassot, Valencia, España), Ingeniero **Vitelmo V. Bertero** (Berkeley, California, Estados Unidos), Doctor **David I. Blockley** (Bristol, Inglaterra), Profesor **Vinicio Boffi** (Roma, Italia), Doctor **Kåre Bremer** (Estocolmo, Suecia), Doctor **Luis A. Caffarelli** (Princeton, New Jersey, Estados Unidos), Doctor **César A. Carranza Saravia** (Lima, Perú), Doctor **Eduardo E. Castellano** (San Carlos, San Pablo, Brasil), Doctora **Catherine Cesarsky** (Paris, Francia), Doctor **Michael Clegg** (Irvine, California, Estados Unidos), Doctor **Juan Alberto Costamagna** (Santiago, Chile), Doctor **John C. Crowell** (Santa Barbara, California, Estados Unidos), Doctor **Héctor R. Croxatto** (Santiago, Chile), Doctor **Britton Chance** (Philadelphia, Pennsylvania, Estados Unidos), Doctor **John W. Daly** (Bethesda, Maryland, Estados Unidos), Doctor **Ubiratán D'Ambrosio** (Campinas, Brasil), Doctora **Angela F. Danil de Namor** (Guildford, Surrey, Inglaterra), Doctor **Walter F. Davidson** (Ottawa, Ontario, Canadá), Ingeniero **Don U. Deere** (Gainesville, Florida, Estados Unidos), Profesor **Patrick J. Dowling** (Guildford, Surrey, Inglaterra), Doctor **Horacio A. Farach** (Columbia, South Carolina, Estados Unidos), Doctor **Rodolfo Gambini** (Montevideo, Uruguay), Doctor **Francisco Giral** (México, México), Doctor **Eduardo D. Glandt** (Philadelphia, Pennsylvania, Estados Unidos), Doctor-Ingeniero **Rafael A. Guarga Ferro** (Montevideo, Uruguay), Doctor **Cristián E. Gutiérrez** (Philadelphia, Estados Unidos), Doctor **Bernard L. Horecker** (Fort Myers, Florida, Estados Unidos), Doctor **Derek Horton** (Washington D.C., Estados Unidos), Doctor-Ingeniero **Gerhard H. Jirka** (Karlsruhe, Alemania), Doctor **Shyam L. Kalla** (Maracaibo, Venezuela), Doctora **Eugenia Kalnay** (College Park, Maryland, Estados Unidos), Doctor **Marcus Karel** (Cambridge, Massachusetts, Estados Unidos), Doctor **Ephraim Katzir** (Tel-Aviv, Israel), Profesor-Doctor **Dieter M. Kolb** (Ulm, Alemania), Doctor **Bernt Krebs** (Münster, Alemania), Doctor **Michio Kuriyagawa**, (Kyoto, Japón), Doctor **José Leite Lopes** (Río de Janeiro, Brasil), Profesor **Pierre Léna** (París, Francia), Doctor **Enrique P.**

Lessa (Montevideo, Uruguay), Doctor **Jorge Lewowicz** (Montevideo, Uruguay), Doctor **Eduardo A. Lissi Gervaso** (Santiago, Chile), Ingeniero **Giovanni Lombardi** (Locarno, Suiza), Doctor **Emilio Lluís Riera** (México, México), Ingeniero **Mauricio Matos Peixoto** (Río de Janeiro, Brasil), Doctor **James R. Mattoon** (Colorado Springs, Colorado, Estados Unidos), Ingeniero **Victor F.B. de Mello** (San Pablo, Brasil), Profesor **Marvin Minsky** (Cambridge, Massachusetts, Estados Unidos), Profesor **Marcos Moshinsky** (México, México), Doctor **Achim Müller** (Bielefeld, Alemania), Doctor **Daniele Mundici** (Firenze, Italia), Doctor **Eduardo L. Ortiz** (London, Inglaterra), Doctor **Norberto J. Palleroni** (Norths Caldwell, New Jersey, Estados Unidos), Doctor **Rafael Radi** (Montevideo, Uruguay), Doctor **Peter H. Raven** (St. Louis, Missouri, Estados Unidos), Doctor **Lázaro Recht** (Caracas, Venezuela), Doctor-Ingeniero **Jorge Riera** (Porto Alegre, Brasil), Doctor **Sixto Ríos García** (Madrid, España), Doctor **Juan G. Roederer** (Fairbanks, Alaska, Estados Unidos), Profesor-Doctor **Herbert W. Roesky** (Göttingen, Alemania), Doctor **Igor Saavedra** (Santiago, Chile), Doctor Ingeniero Agrónomo **Oswaldo E. Sala** (Providence, Estados Unidos) Doctor-Ingeniero **Juan Carlos Santamarina** (Atlanta, Georgia, Estados Unidos), Doctor **Alberto Sirlin** (New York, Estados Unidos), Doctor **Edward C. Slater** (Southampton, Inglaterra), Doctor **Peter Thieberger** (Upton, New York, Estados Unidos), Doctor **Antonio F. R. de Toledo Piza** (San Pablo, Brasil), Doctor **José Luis Torrea Hernández** (Madrid, España), Doctor **Sergio Trasatti** (Milán, Italia), Ingeniero **Milton Vargas** (San Pablo, Brasil), Doctor **Luis Vargas Fernández** (Santiago, Chile), Doctor **Miguel Ángel Virasoro** (Roma, Italia), Doctor **Gerd E.G. Westermann** (Hamilton, Canadá), Profesor **Robin C. Whatley** (Aberystwyth, Gales), Profesor-Ingeniero **Walter Wittke** (Aachen, Alemania), Doctor **Rubén Zamar** (Vancouver, Canadá).

ACADÉMICOS CORRESPONDIENTES NACIONALES

Profesor **Enrique Balech** (Necochea), Doctor **Carlos Balseiro** (Bariloche), Doctor **Néstor O. Bianchi** (La Plata), Doctor **Antonio Blanco** (Córdoba), Doctor **Mario H. Burgos** (Mendoza), Doctor **Mario A. G. Castagnino** (Rosario), Doctor **Hernán Cendra** (Bahía Blanca), Ingeniero **Roberto O. Cudmani** (S.M. de Tucumán), Doctor-Ingeniero **Rodolfo F. Danesi** (S.M. de Tucumán), Doctor **Diego de Mendoza** (Rosario, Santa Fe), Ingeniero **Luis D. Decanini** (Córdoba), Doctor **Pedro Depetris**, (Córdoba), Doctora **Sandra M. Díaz** (Córdoba), Doctor **Alejandro Fainstein** (Bariloche), Doctor **Ricardo N. Farías** (S.M. de Tucumán), Ingeniero **Pedro Carlos O. Fernández** (Mendoza), Doctora **Eleonor Harboure** (Santa Fé), Doctor **Félix E. Herrera** (Ciudad Autónoma de Buenos Aires), Ingeniero **Luis J. Lima** (La Plata), Doctor **Arturo López Dávalos** (S.C. de Bariloche), Ingeniero **César J. Luisoni** (La Plata), Doctor **Hugo J.F. Maccioni** (Córdoba), Doctor **Roberto A. Macías** (Santa Fe), Doctor **Ezio Marchi** (San Luis), Doctor **Igor F. Mirabel** (Ciudad Autónoma de Bs. Aires), Doctor **Rafael Panzone** (Bahía Blanca), Doctor **Rubén D. Piacentini** (Rosario), Ingeniero **Carlos A. Prato** (Córdoba), Ingeniero **Juan Carlos Reimundín** (S.M. de Tucumán), Ingeniero **Jean Riubrugent** (La Plata), Doctor **Edmundo A. Rúveda** (Rosario), Doctor **Juan A. Tirao** (Córdoba), Ingeniero **Jorge R. Tosticarelli** (Rosario), Ingeniero **Silvano J. Trevisán** (La Plata), Doctor **Walter E. Triaca** (La Plata), Doctor **Rubén H.**

Vallejos (Rosario), Doctora Noemí **Walsøe de Reca** (Ciudad de Buenos Aires), Doctor **Eduardo H. Zarantonello** (Mendoza).

SECCIONES SECCIÓN DE MATEMÁTICA, FÍSICA Y ASTRONOMÍA

Presidente: Dr. Alberto Pignotti

Secretario: Dr. Victor Yohai

Vocales: Dr. Roberto L.O. Cignoli, Dr. Gustavo Corach, Dr. Francisco de la Cruz, Dr. Ricardo Durán, Dr. Huner Fanchiotti, Dr. Norberto Fava, Dr. Mario A.J. Mariscotti, Dr. Roberto P.J. Perazzo, Dr. Jorge E. Solomin, Dr. Héctor Vucetich, Dra. Mariana D. Weissmann.

SECCIÓN DE INGENIERÍA

Presidente: Dr. Roberto J.J. Williams

Secretario: Ing. Luis De Vedia

Vocales: Ing. Arturo J. Bignoli, Dr. Alfredo Calvelo, Dr. Ing. Eduardo Dvorkin, Dr. Ing. Raúl A. Lopardo, Ing. Eduardo Nuñez, Ing. Horacio C. Reggini, Dra. Marta Rosen.

SECCIÓN DE CIENCIAS QUÍMICAS, DE LA TIERRA Y BIOLÓGICAS

Presidente: Dr. Enrique J. Baran.

Secretario: Dr. Rodolfo R. Brenner.

Vocales: Dra. Zulma N. Brandoni de Gasparini, Dr. Eduardo H. Charreau, Dr. Jorge V. Crisci, Dr. Roberto J. Fernández Prini, Dr. Armando J. Parodi, Dr. Carlos Washington Rapela, Dra. Norma E. Sbarbati de Nudelman.

COMISIONES COMISIÓN DE BECAS Y PREMIOS

Miembros: Presidente: Dr. Eduardo Charreau
Doctores Alfredo Calvelo, Mariana D. Weissmann.

COMISIÓN DE BIBLIOTECA Y PUBLICACIONES

Miembros: Presidente: Dr. Enrique J. Baran.
Ing. Horacio Reggini y Dr. Víctor Yohai.

COMISIÓN DE INTERPRETACIÓN Y REGLAMENTO

Miembros: Presidente: Dr. Roberto Fernández-Prini
Ing. Eduardo Nuñez, Dr. Roberto Cignoli

COMISIÓN DE SUPERVISIÓN DEL INSTITUTO DE BOTÁNICA DARWINION

Miembros: Presidente: Dr. Eduardo Charreau
Doctor Armando J. Parodi

COMISIÓN ESPECIAL PARA EL MEJORAMIENTO DE LA ENSEÑANZA DE LAS CIENCIAS

Miembros: Presidente: Dra. Norma S. de Nudelman
Dr. Norberto Fava, Dr. Ing. Raúl Lopardo.

COMISIÓN ESPECIAL DE ÉTICA EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA

Miembros: Presidente: Dr. Daniel R. Bes (Académico Honorario).
Doctores Mario A.J. Mariscotti y Armando J. Parodi.

COMISIÓN PROYECTOS TECNOLOGICOS Y ENERGÍA

Miembros: Presidente: Dr. Ing. Eduardo Dvorkin
Doctores Roberto Perazzo, Mario Mariscotti, Roberto Fernández-Prini,
Roberto J.J. Williams.

COMISIÓN DE RELACIONES INTER- INSTITUCIONALES

Miembros: Presidente: Dr. Roberto Cignoli
Doctores Armando Parodi, Mario Mariscotti y Marta Rosen.

COMISIÓN DE PRENSA

Miembros: Presidente: Dr. Roberto Cignoli.
Doctor Jorge Crisci

COMISIÓN DE PORTAL Y PAGINA WEB

Miembros: Presidente: Dr. Enrique Baran.
Dra. Mariana Weissmann, Ing. Horacio Reggini.

COMISIÓN DE INFRAESTRUCTURA Y MANTENIMIENTO EDILICIO

Miembros: Presidente: Dr. Roberto Cignoli.
Dr. Eduardo Charreau.